«ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА»,
1981, том 12, вып. 2

УДК 538.21
539.171.4.162.2

РАССЕЯНИЕ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

А. Л. Куземский

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Показано, что широкий круг явлений в ферромагнитных переходных металлах и их сплавах, изучаемый с помощью рассеяния медленных нейтронов, можно последовательно описать с единой точки зрения, используя модель Хаббарда и ее обобщения. Обсуждаются некоторые новые возможности метода нейтронной спектроскопии, которые открываются с вводом мощных импульсных источников, таких, как ИБР-2.

It is shown that a number of problems in ferromagnetic transition metals and their alloys, studied by the neutron scattering, can be described in unified manner using the Hubbard model and its generalizations. A possibility of measuring the Stoner excitations in nickel using the high flux pulsed reactor IBR-2 is discussed. Because of the power and specific characteristics of IBR-2 the high intensive flow of neutrons can be obtained and the suggested experiment can be performed for the realistic time of measurements.

ВВЕДЕНИЕ

Пятьдесят лет тому назад авторы наиболее полной по тем временам монографии о магнетизме следующим образом характеризовали положение дел в физике магнитных явлений: «Еще недавно вопросы магнетизма представлялись исключительно неблагодарной областью для теоретических исследований. Такое положение стояло в связи с тем обстоятельством, что внимание исследователей направлялось главнейшим образом в сторону ферромагнитных явлений, ибо эти последние играли и играют весьма крупную роль в технике. Теоретическое же толкование ферромагнетизма представляет столь значительные трудности, что и поныне названная область является одной из наиболее темных во всей физике» [1].

За истекшие десятилетия физика магнитных явлений превратилась в очень обширную и разветвленную отрасль современной физической науки [2]. В значительной мере прогресс в изучении структурных и динамических свойств магнитных веществ обязан достижениям магнитной нейтронографии [3, 4]. Уникальные воз-

можности метода рассеяния тепловых нейтронов позволяют получать информацию о магнитной и кристаллической структуре, распределении магнитных моментов, о спектре магнитных возбуждений, критических флуктуациях и т. п. Для интерпретации полученных данных необходимо учитывать электрон-электронные и электрон-ядерные взаимодействия в системе и принцип Паули. Таким образом, магнетизм можно последовательно описать только в рамках квантовой статистической теории конденсированного состояния.

Благодаря наличию внутренней недостроенной *nd*- или *nf*-оболочки все свободные атомы переходных элементов сильномагнитные в силу правила Хунда. При образовании кристалла оболочки атомов перестраиваются и для ясного понимания свойств кристалла необходимо знать волновые функции и энергии бывших валентных электронов. Расчет энергетических уровней электронов в кристалле весьма сложен [5, 6]; говоря качественно, речь идет о том, насколько изменяются при образовании кристалла атомные волновые функции валентных электронов, насколько они делокализуются.

В теории магнетизма оказался очень эффективным метод модельных гамильтонианов. Без преувеличения можно сказать, что огромные успехи физики магнитных явлений в значительной мере обусловлены использованием для «теоретического толкования ферромагнетизма» нескольких очень простых и схематических модельных представлений. Этих моделей, которые в настоящее время используются в квантовой теории магнетизма, по существу, три.

Исторически первой была модель локализованных спинов Гейзенберга (и ее предельный случай модель Изинга [7]), затем были предложены модель ферромагнитной ферми-жидкости [2] и модель Хаббарда [8].

Модель Гейзенберга [2—4, 9] основана на предположении о том, что волновые функции магнитоактивных электронов в кристалле мало отличаются от атомных орбиталей. Считается, что эта модель в основном применима к веществам, у которых энергия основного состояния отделена щелью конечной ширины от энергии возбужденных токовых состояний, т. е. к полупроводникам и изоляторам. Эта модель также хорошо применима к ряду магнитных редкоземельных элементов, поскольку недостроенные *f*-слои имеют малые эффективные радиусы (для многих редкоземельных *f*-металлов важную роль в установлении магнитного порядка играет косвенный обмен через электроны проводимости).

Модель коллективизированных электронов [1, 10] или модель ферромагнитной ферми-жидкости применяется к металлам, в которых система бывших валентных электронов образует по всему объему кристалла подвижную ферми-жидкость. (Иногда для

d-металлов, у которых недостроенные d-слои имеют не столь малые эффективные радиусы как f-слои, и потому имеется заметное перекрытие между ближайшими соседями, говорят о смеси двух ферми-жидкостей из s- и d-электронов.)

Модель узких зон или модель Хаббарда [8, 11] в определенном смысле является промежуточной моделью и первоначально была предложена для описания $3d$-металлов. В настоящее время модель Хаббарда и ее обобщения применяются для описания магнитных свойств чистых $3d$-металлов и их сплавов, халькогенидов переходных и редкоземельных металлов, актиноидов и др.

Таким образом, все три модели по-разному отвечают на вопрос о том, как и насколько изменяются волновые функции бывших валентных электронов в кристалле. Использование упомянутых моделей (или их комбинаций) позволяет описать очень широкий круг явлений и получать качественные, а часто и количественные, правильные результаты. Иногда (не всегда) очень сложные и трудоемкие расчеты электронной зонной структуры практически не добавляют ничего нового по сравнению с результатами, полученными на основе указанных схематических и грубых моделей.

Однако несмотря на достигнутые успехи в понимании физики магнитных явлений из-за трудностей точного расчета электронной зонной структуры и проведения всех необходимых экспериментов, мы все еще, за исключением редкоземельных элементов, не можем с полной определенностью утверждать, какая из указанных микроскопических моделей (или их комбинаций) наиболее адекватно приближает реальную ситуацию в том или ином веществе. Вот почему определение истинного механизма возникновения магнитоупорядоченного состояния считается в настоящее время проблемой номер один в теории магнетизма.

Точное понимание физических процессов, приводящих к появлению ферромагнетизма, особенно важно, когда переходим к теоретическому описанию сплавов ферромагнитных переходных металлов. Сплавы магнитных металлов широко используются в технике, поэтому их теоретическое изучение имеет большое прикладное значение.

В настоящем обзоре покажем, что исследование спектра магнитных возбуждений чистых переходных металлов и их сплавов представляет большой интерес для уточнения наших модельных теоретических представлений о природе магнитного состояния в этих веществах. Наиболее прямым и удобным методом экспериментального изучения спектра магнитных возбуждений является метод неупругого рассеяния тепловых нейтронов. В связи с этим обсуждаются некоторые новые возможности метода нейтронной спектроскопии, которые открываются с вводом мощных импульсных источников нейтронов, таких, как ИБР-2. В частности, рассма-

тривается возможность прямого измерения стонеровских возбуждений в ферромагнитных переходных металлах. Прямое измерение стонеровских возбуждений в широком интервале переданных импульсов и энергий имеет большое значение для суждения о степени локализации или делокализации магнитоактивных электронов в ферромагнитных переходных металлах. Показано, что использование модели Хаббарда позволяет с единой точки зрения описать весьма широкий круг вопросов магнитного поведения чистых ферромагнитных переходных металлов и их сплавов.

1. МОДЕЛЬ ХАББАРДА

В последние годы довольно большое распространение при описании магнитных и электрических свойств переходных металлов и их сплавов получила модель Хаббарда [8, 11, 12]. В настоящей работе покажем, что спектр возбуждений модели Хаббарда и некоторых ее простых модификаций представляет значительный интерес с точки зрения применения метода рассеяния нейтронов. Сначала будем говорить о чистых $3d$-металлах, а более конкретно — о никеле, железе и кобальте. Считается [13], что исходный энергетический спектр системы представляет собой широкую sp-зону, в которую погружена система пяти узких пересекающихся d-зон (рис. 1). В модели Хаббарда сделана попытка учесть весь комплекс необычных свойств $3d$-металлов. В частности, из эксперимента известно, что спин-волновое рассеяние медленных нейтронов [3, 4] в этих веществах можно описывать на основе модели Гейзенберга. Найдено также, что распределения зарядовой плотности в ферромагнитных металлах близки к атомным распределениям [2—4]. С другой стороны, средние атомные магнитные моменты заметно отличаются от атомных и являются дробными. О значительном вкладе d-электронов в низкотемпературную теплоемкость $c_{эл} = \pi^3/3g(\varepsilon_f)\times$ $\times T = \gamma T$ говорит то, что коэффициент γ у переходных металлов больше, чем у нормальных. О сильной коллективизации d-электронов говорят также оценки энергии связи и исследование ферми-поверхностей.

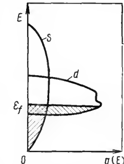


Рис. 1. Схема зонной структуры ферромагнитного переходного металла

В модели Хаббарда [8, 11, 12] эти аспекты поведения системы удается описать, предполагая, что d-электроны образуют зону, но испытывают сильное кулоновское отталкивание на одном узле решетки.

Рассмотрим систему d-электронов, гамильтониан которой имеет обычный вид [4]

$$H = \sum_i \left[\frac{1}{2m} \mathbf{p}_i^2 + v(\mathbf{r}_i) \right] + 1/2 \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = h + V \qquad (1)$$

Перейдем к представлению вторичного квантования, вводя полевые операторы $\Psi_\sigma(\mathbf{r})$ и $\Psi_\sigma^+(\mathbf{r})$. В этом представлении гамильтониан (1) приобретает следующий вид:

$$H = \sum_\sigma \int d^3r \Psi_\sigma^+(\mathbf{r})\, h \Psi_\sigma(\mathbf{r}) +$$

$$+ 1/2 \sum_{\sigma\sigma'} \int\int d^3r d^3r' \Psi_\sigma^+(\mathbf{r}') \Psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r})\, V \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \Psi_\sigma(\mathbf{r}). \qquad (2)$$

Собственные функции невозмущенного гамильтониана h образуют полную ортонормируемую систему функций, называемых *блоховскими функциями*, $\{\varphi_{kn\sigma}(\mathbf{r})\}$. Индекс n характеризует какую-то данную зону. Используя разложение полевых операторов через операторы $a_{kn\sigma}^+$ и $a_{kn\sigma}$ для блоховских состояний $\varphi_{kn\sigma}$:

$$\Psi_\sigma^+(\mathbf{r}) = \sum_{kn} \varphi_{kn\sigma}^*(\mathbf{r})\, a_{kn\sigma}^+, \qquad (3)$$

перепишем гамильтониан (2) в виде

$$H = \sum_{kn\sigma} \varepsilon_n(\mathbf{k})\, a_{kn\sigma}^+ a_{kn\sigma} +$$

$$+ 1/2 \sum_{kk'q} \sum_{\substack{mn \\ pf}} \sum_{\sigma\sigma'} V_{nm,\, pf}(\mathbf{k},\, \mathbf{k}',\, \mathbf{q})\, a_{kn\sigma}^+ a_{k'+q'p\sigma'}^+ a_{k+qm\sigma} a_{k'f\sigma}. \qquad (4)$$

Здесь

$$V_{nm,\, pf}(\mathbf{k},\, \mathbf{k}',\, \mathbf{q}) = \langle \varphi_{kn\sigma}(r)\, \varphi_{k+qp\sigma'}(r') | V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \varphi_{k+qm\sigma'} \varphi_{k'f\sigma} \rangle. \qquad (5)$$

Собственные функции невозмущенного гамильтониана $\varphi_{kn\sigma}(\mathbf{r})$ можно разложить в ряд Фурье следующим образом:

$$\varphi_{kn\sigma}(\mathbf{r}) = N^{-1/2} \sum_i \phi_{n\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_i). \qquad (6)$$

Функции $\phi_{n\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, известные как функции Ванье, локализованы в пространстве и ведут себя подобно атомным волновым функциям; они образуют полную ортонормированную систему функций, полученную из $\varphi_{kn\sigma}(\mathbf{r})$ с помощью унитарного преобразования, коэффициенты которого равны $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_i)$. Число атомов в кристалле обозначено N. Точный характер локализации функций Ванье проанализировать довольно трудно [5]; ясно,

однако, что на больших расстояниях функции Ванье малы. В реальных расчетах предполагается, что функции Блоха, соответствующие волновому вектору $\mathbf{k}$ в n-й зоне, можно вычислить одним из известных методов, например, с использованием $X\alpha$-метода [6].

Запишем теперь гамильтониан (2) в представлении вторичного квантования в базисе Ванье:

$$H = \sum_{ij} \sum_{mm'\sigma} t_{ij}^{mm'} a_{im\sigma}^{+} a_{jm'\sigma} +$$

$$+ 1/2 \sum_{ijkl} \sum_{\substack{mn \\ m'n'}} \sum_{\sigma\sigma'} \left\langle im\sigma, jn\sigma' \left| \frac{1}{r} \right| km'\sigma,\ ln'\sigma' \right\rangle a_{im\sigma}^{+} a_{jn\sigma'}^{+} a_{ln'\sigma'} a_{km'\sigma}; \quad (7)$$

$$t_{ij}^{mm'} = \int d^3 r \phi_m^* (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)\, h(\mathbf{r})\, \phi_{m'} (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j); \quad (8)$$

$$\left\langle im\sigma,\ jn\sigma' \left| \frac{1}{r} \right| km'\sigma,\ ln'\sigma \right\rangle =$$

$$= e^2 \int \frac{\phi_m^* (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)\, \phi_n^* (\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)\, \phi_{m'} (\mathbf{r} - \mathbf{R}_k)\, \phi (\mathbf{r}' - \mathbf{R}_e)\, d^3 r d^3 r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (9)$$

Матричный элемент $t_{ij}^{mm'}$ описывает перескоки электрона с атома на атом для разных орбитальных состояний; чем больше частота перехода, тем сильнее коллективизация электронов, т. е. ширина полос тем меньше, чем прочнее связаны электроны.

Для простоты, в этом разделе ограничимся случаем одной зоны. Удобно также представить гамильтониан (7) в следующей форме:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} + U/2 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} +$$

$$+ 1/2 \sum_{ij}{}' \sum_{\sigma\sigma'} \left\langle ij \left| \frac{1}{r} \right| ij \right\rangle n_{i\sigma} n_{j\sigma'} - 1/2 \sum_{ij}{}' \sum_{\sigma\sigma'} J_{ij} a_{i\sigma}^{+} a_{i\sigma'} a_{j\sigma'}^{+} a_{j\sigma} +$$

$$+ \sum_{ij}{}' \sum_{\sigma\sigma'} \left\langle ii \left| \frac{1}{r} \right| jj \right\rangle a_{i\sigma}^{+} a_{i\sigma'} a_{j\sigma'}^{+} a_{j\sigma}. \quad (10)$$

Здесь введены обозначения:

$$U = e^2 \int |\phi (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)|^2\, |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}\, |\phi (\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)|^2\, d^3 r d^3 r';$$

$$J_{ij} = e^2 \int \phi^* (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)\, \phi (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \phi^* (\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j)\, \phi (\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)\, d^3 r d^3 r',$$

где J_{ij} — интеграл прямого обмена; U — интеграл внутриатомной кулоновской корреляции электронов с противоположными спинами. Третий член в (10) с точки зрения магнетизма не представляет интереса, так как он пропорционален $A_{ij} n_i n_j$. Последний

член в (10) описывает переходы антипараллельных спиновых пар; эти эффекты не будем рассматривать здесь. Оценки показывают [4], что для многих переходных металлов и их соединений наибольшим интегралом в (10) оказывается U. Исходя из этого, Хаббард [8] предложил следующую модель:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}. \qquad (11)$$

Отталкивание электронов на одном центре U не убывает при разведении атомов.

Таким образом, в модели Хаббарда заключена возможность перехода от простой зонной схемы к описанию типа Гайтлера — Лондона. Поэтому можно ожидать, что наиболее интересные эффекты: переход от обычного металла при $|t_{ij}| \gg U$, описываемого зонной схемой, к диэлектрику с сильной корреляцией гайтлер-лондоновского типа при $|t_{ij}| \ll U$, а также различные магнитные свойства должны содержаться уже в гамильтониане (11). Возможность построения интерполяционных решений — от атомного до зонного предела, описывающих схлопывание щели в спектре одночастичных состояний, — была показана в [14—17].

В случае одного электрона на атом ($n = 1$) при сильном взаимодействии ($U \gg |t_{ij}|$) в рамках теории возмущений второго порядка можно показать [11], что эффективный гамильтониан $H_{эф} = H(U)(E_0 - H(t_{ij}))^{-1} H(U)$ сводится к антиферромагнитному гамильтониану Гейзенберга:

$$H_{эф} = \frac{1}{2} \sum_{ij}{}' |t_{ij}|^2/U \{\sigma_i \sigma_j - 1\}.$$

Таким образом, основное состояние системы для сильной корреляции и наполовину заполненной зоны скорее является антиферромагнитным.

Гамильтониан Хаббарда обладает свойством ротационной инвариантности. Это означает, что при действии оператора спинового вращения $R = \exp\{-\frac{1}{2} i\varphi \sum_j \sigma_j \hat{\mathbf{k}}\}$ ($R^+R = RR^+ = 1$), где φ — угол вращения вокруг единичной оси $\hat{\mathbf{k}}$ справедливо равенство $H' = RHR^+$. Здесь $\sigma_{ix} = (a^+_{i\uparrow} a_{i\downarrow} + a^+_{i\downarrow} a_{i\uparrow})$; $\sigma_{iy} = -i(a^+_{i\uparrow} a_{i\downarrow} - a^+_{i\downarrow} a_{i\uparrow})$; $\sigma_{iz} = (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$. Относительно обращения времени T ($T^+T = TT^+ = 1$) можно также показать инвариантность гамильтониана Хаббарда: $H' = THT^+$. Обращение времени приводит для кристалла к выполнению важного равенства $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(-\mathbf{k})$ вне зависимости от пространственной симметрии системы. Свойство ротационной инвариантности гамильтониана также приводит к важным физическим следствиям общего характера, к обсуждению которых и перейдем.

2. ОБОБЩЕННАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ И СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ

Согласно теории линейного отклика [18], можно ввести обобщенную спиновую восприимчивость $X(\mathbf{q}, \omega)$. Если внешнее магнитное поле достаточно мало, намагниченность, вызываемая им, определяется по формуле

$$M(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' dt' X(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t-t') H(\mathbf{r}', t'). \quad (12)$$

После фурье-преобразования получим $M(\mathbf{q}, \omega) = X(\mathbf{q}, \omega) \times H(\mathbf{q}, \omega)$. Здесь $X(\mathbf{q}, \omega)$ описывает отклик системы на внешнее магнитное поле $H(\mathbf{r}, t) = H(\mathbf{q}, \omega) \exp[\mathrm{i}(\mathbf{qr} - \omega t)]$. Если поле реально, намагниченность

$$M(\mathbf{r}, t) = H(\mathbf{q}, \omega) \operatorname{Re}\{X(\mathbf{q}, \omega) \exp[\mathrm{i}(\mathbf{qr} - \omega t)]\}. \quad (13)$$

Частотная зависимость восприимчивости определяется запаздывающим коммутатором

$$X(\mathbf{r}-\mathbf{r}', \omega) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt \exp(\mathrm{i}\omega t) \langle [M(\mathbf{r}, t), M(\mathbf{r}, 0)] \rangle. \quad (14)$$

Для свободных электронов статическая спиновая восприимчивость (восприимчивость Паули):

$$X_p = 2\mu_B^2 D(\varepsilon_f),$$

где $\mu_B = e\hbar/(2mc)$ — магнетон Бора; $D(\varepsilon_f)$ — плотность состояний на уровне Ферми.

Обобщенная спиновая восприимчивость для системы взаимодействующих электронов определяется следующим выражением:

$$X^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = (g\mu_B)^2 \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt \exp(\mathrm{i}\omega t) \langle [S^{\alpha}(\mathbf{r}, t), S^{\beta}(\mathbf{r}', 0)] \rangle. \quad (15)$$

Для гамильтониана Хаббарда (11) в приближении Хартри — Фока $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \to \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle$ получим для энергий электронов в магнитном поле:

$$E_{k\uparrow} = \varepsilon_k + U\langle n_{\downarrow} \rangle - (g\mu_B/2) H;$$
$$E_{k\downarrow} = \varepsilon_k + U\langle n_{\uparrow} \rangle + (g\mu_B/2) H.$$

Статическая восприимчивость (15) при $T = 0$ в этом случае вычисляется элементарно

$$X = (g^2\mu_B^2/2) D(\varepsilon_f)/[1 - UD(\varepsilon_f)]. \quad (16)$$

Этот результат был впервые получен Стонером. Величина $S = (1 - UD(\varepsilon_f))^{-1}$ получила название *стонеровского усиления.*

Критерий возникновения магнетизма Стонера имеет вид $UD(\varepsilon_f) > 1$ и связан с возникновением особенности восприимчивости. Возникновение особенности восприимчивости (15) при q, $\omega \to 0$ в самом общем случае было проанализировано Эдвардсом и Фишером [19]. Поскольку для модели Хаббарда полный спин является интегралом движения ($[\sum_i S_i^z, H] = 0$), то операторы $S^\pm = S^x \pm iS^y$ изменяют общую z-компоненту на ± 1. При этом с гамильтонианом коммутирует также оператор $\sum_i S_i^-$. Эдвардс и Фишер показали, что из свойства ротационной инвариантности модели Хаббарда следует наличие спин-волнового полюса у обобщенной спиновой поперечной восприимчивости $X^{+-}(\mathbf{q}, \omega)$ следующего вида:

$$\hbar\Omega_q = Dq^2 + O(q^4);$$
$$Dq^2 = \frac{1}{2\langle S^z\rangle}\{\hbar q\langle[J_{\mathbf{q}}^-, S_{-\mathbf{q}}^+]_-\rangle - \hbar^2 q^2 \lim_{\omega\to 0}\lim_{q\to 0} X_J\}. \quad (17)$$

Здесь введены обозначения:

$$\left.\begin{aligned} X_J &= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt \exp(i\omega t)\langle[J_{\mathbf{q}}^-(t), J_{-\mathbf{q}}^+]\rangle; \\ \hbar q J_{\mathbf{q}}^- &= [S^-(\mathbf{q}), H]. \end{aligned}\right\} \quad (18)$$

В пределе $\omega \to 0$, $q/\omega \to 0$, выражение (17) является точной формулой, справедливой для любого металлического или неметаллического ферромагнетика или неферромагнетика в статическом магнитном поле. В общем случае D определяется зонной структурой кристалла. Для простой кубической решетки приближение хаотических фаз дает для модели Хаббарда следующий результат [4]:

$$D = \frac{U}{6\Delta}\sum_k\{\nabla_k^2\varepsilon_k\}(n_{k\uparrow} + n_{k\downarrow}) + \frac{U}{3\Delta^2}N^{-1}\sum_k\{\nabla_k\varepsilon_k\}^2(n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}). \quad (19)$$

Здесь $\varepsilon_k = \sum_{ij} t_{ij}\exp\{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)\}$ — зонная энергия; $\Delta = \frac{U}{N}\left(\sum_p (n_{p\downarrow} - n_{p\uparrow})\right)$ — зонное расщепление. Обобщенная восприимчивость $X^{+-}(q, \omega)$ удовлетворяет важному правилу сумм:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{Im} X^{+-}(q, \omega)\, d\omega = \frac{\pi}{\hbar}(n_\downarrow - n_\uparrow) = -\frac{2\pi}{\hbar}\langle S^z\rangle. \quad (20)$$

Точная формула Эдвардса и Фишера [19] для восприимчивости

$$X = -\frac{2\langle S^z\rangle}{\hbar\omega} + \frac{q^2}{\omega^2}\left\{X_J - \frac{1}{\hbar q}\langle[J_{\mathbf{q}}^-,\ S^+(-\mathbf{q})]\rangle\right\} \qquad (21)$$

показывает, что при $q = 0$ имеем только первый член в (21), который отвечает полюсу спин-волнового типа. Правило сумм (20), таким образом, выполняется. Ясно, что для малых q вклад спин-волнового полюса должен преобладать. Это обстоятельство имеет очень большое значение при анализе рассеяния медленных нейтронов. Таким образом, наличие спин-волнового полюса в спектре магнитных возбуждений системы является следствием ротационной инвариантности гамильтониана.

Еще в ранней работе Херринг и Киттель [20] показали, что в простых приближениях спиновые волны равно хорошо можно описать как в рамках модели локализованных спинов, так и в рамках модели коллективизированных электронов [21]. Поэтому изучение, например, температурной зависимости среднего момента в Ni и Fe в рамках низкотемпературной спин-волновой теории, как правило, не дает указаний в пользу той или иной модели. Для проверки зонной теории магнетизма предлагали разные способы (см., например, [22]). Интересный результат был получен в работе Фонера и др. [21] с помощью эффекта Мёссбауэра. Основываясь на предсказании Вольфарта [23], они исследовали поведение Fe и Ni в очень сильных магнитных полях (выше технического насыщения) при $T = 4{,}2$ K. В данной области вклад спиновых волн практически полностью подавлен. Они нашли, что восприимчивость $X_{HF} = \partial M/\partial H > 0$, в то время как для модели локализованных спинов при тех же условиях должно быть $X_{HF} = 0$. Это важный аргумент в пользу зонной модели магнетизма. Однако для интерпретации эксперимента в [21] используется простейшая модель Стонера (16), и в результате выводы носят лишь качественный характер.

С нашей точки зрения [24, 25] наиболее отчетливо различие между моделями проявляется в спектре магнитных возбуждений. Коллективизированная модель имеет более сложный спектр, чем модель локализованных спинов. Этот спектр представляет собой наибольший интерес с точки зрения применения метода рассеяния медленных нейтронов, который уникален при непосредственном изучении магнитной динамики магнитоупорядоченных веществ.

3. ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ В ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ

Среди экспериментальных методов, используемых в физике твердого тела, нейтронные методы занимают совершенно особое место. Рассеяние медленных нейтронов позволяет определить кристаллическую структуру, положение атомных магнитных мо-

ментов, распределение неспаренных электронов, частотные спектры и кривые дисперсии различных элементарных возбуждений. В данном разделе рассмотрим рассеяние медленных нейтронов магнитными возбуждениями переходного металла.

Как хорошо известно [3, 4], сечение неупругого рассеяния нейтронов выражается через мнимую часть обобщенной спиновой восприимчивости $X^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$. Поперечная спиновая восприимчивость определяется следующим образом:

$$X^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = (g\mu_B)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle S^+(\mathbf{q}, t) S^-(-\mathbf{q}) \rangle\rangle \exp(i\omega t)\, dt, \quad (22)$$

где

$$\langle\langle A(t), B \rangle\rangle = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t)\langle [A(t), B]\rangle$$

— двухвременная запаздывающая температурная функция Грина [18]. Спиновые операторы в (22) выражаются операторами вторичного квантования в q-представлении [4]:

$$S^+(\mathbf{q}) = F(\mathbf{q}) \sum_k S_k^+(\mathbf{q}) = F(\mathbf{q}) \sum_k a_{k+q,\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow};$$

$$S^-(\mathbf{q}) = F(\mathbf{q}) \sum_k S_k^-(q) = F(\mathbf{q}) \sum_k a_{k\downarrow}^\dagger a_{k+q,\uparrow};$$

$$F(\mathbf{q}) = \int d^3r \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) |\phi(\mathbf{r})|^2.$$

Тогда сечение неупругого рассеяния нейтронов на поперечных спиновых компонентах запишется в виде [4]

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2 \frac{k}{k_0} |F(\mathbf{q})|^2 \frac{1}{4} \{1 + (\tilde{\mathbf{q}}\mathbf{m})^2\} \frac{N}{(g\mu_B)^2 \pi} \times$$
$$\times \frac{1}{1 - \exp(-\hbar\beta\omega)} \{\operatorname{Im} X^{+-}(\mathbf{q}, \omega) - \operatorname{Im} X^{+-}(-\mathbf{q}, -\omega)\}. \quad (23)$$

Поскольку структура обобщенной спиновой восприимчивости и вид ее полюсов определяются выбором модельного гамильтониана системы и характером сделанных при ее вычислении приближений, то по результатам нейтронных экспериментов можно судить об адекватности микроскопических моделей. Однако, чтобы надежно судить о применимости той или иной модели, необходимо измерить восприимчивость во всех точках фурье-пространства и для всех температур, что не всегда позволяет имеющаяся экспериментальная техника. Расчет спиновой восприимчивости $X^{+-}(\mathbf{q}, \omega)$ для модели Хаббарда (11) в приближении хаотических фаз [4, 26] приводит к следующему результату:

$$X^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{X_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U/(g\mu_B)^2 X_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (24)$$

где

$$X_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = (g\mu_B)^2 N^{-1} \sum_k \frac{n_{\mathbf{k}\downarrow} - n_{\mathbf{k+q},\uparrow}}{E(\mathbf{k+q}, \uparrow) - E(\mathbf{k}\downarrow) + \hbar\omega}; \quad (25)$$

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \{\exp[\beta(E(\mathbf{k}\sigma) - \varepsilon_f)] + 1\}^{-1}; \quad E(\mathbf{k}\sigma) = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{U}{N}\sum_p n_{p\sigma}.$$

Формула (24) является динамическим обобщением результата Стонера (16) для $T \neq 0$.

Полюса полной восприимчивости (24) задаются уравнением

$$1 = \frac{U}{N} \operatorname{Re} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}\downarrow} - n_{\mathbf{k+q},\uparrow}}{\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k+q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Delta}. \quad (26)$$

Из уравнения (26) при $\mathbf{q}$, $\omega \to 0$, $|\mathbf{q}|/\omega \to 0$ следует выражение для спин-волнового полюса $\hbar\Omega_q = Dq^2$ вида (19). Среди полюсов

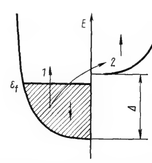


Рис. 2. Возбуждения в коллективизированной модели.

Возбуждения типа 1 происходят без переворота спина, а возбуждения типа 2 — с переворотом

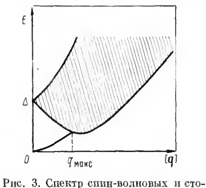


Рис. 3. Спектр спин-волновых и стонеровских возбуждений в однозонной модели Хаббарда

восприимчивости (24) содержатся полюса хартри-фоковской восприимчивости (25):

$$\operatorname{Im} X_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = \pi (g\mu_B)^2 N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k+q},\uparrow} - n_{\mathbf{k}\downarrow})\, \delta(\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k+q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Delta). \quad (27)$$

Возбуждения, определяемые законом дисперсии

$$\hbar\omega_{\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{k+q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \Delta, \quad (28)$$

принято называть *стонеровскими возбуждениями*. В отличие от спин-волновых возбуждений переворот спина определяется здесь не коллективным движением системы, а одночастичным (рис. 2). Схематически вид спектра возбуждений, определяемого уравнением (26), представлен на рис. 3.

Вдали от точки пересечения стонеровского и спин-волнового спектра можно приближенно разделить вклады в сечение рассеяния от этих двух типов возбуждений. Для этого представим $\operatorname{Im} X^{+-}(\mathbf{q}, \omega)$ в виде

$$\operatorname{Im} X^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = \operatorname{Im} X_0^{+-} \{[1 - U/(g\mu_B)^2 \operatorname{Re} X_0^{+-}]^2 + + [U/(g\mu_B)^2 X_0^{+-}]^2\}^{-1}. \quad (29)$$

Так как $\operatorname{Im} X_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = 0$, когда (q, ω) не принадлежит области, в которой заданы стонеровские возбуждения, то из (29) следует, что

$$\frac{U}{(g\mu_B)^2} \operatorname{Im} X^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = -\pi\delta\{1 - U/(g\mu_B)^2 \operatorname{Re} X_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega)\}. \quad (30)$$

Поскольку

$$1 - U/(g\mu_B)^2 \operatorname{Re} X_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega) \approx (\hbar\Omega(\mathbf{Q}) + \hbar\omega)\frac{1}{\Delta},$$

то из (30) получим

$$\operatorname{Im} X^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = -\pi (g\mu_B)^2 \frac{\Delta}{U} \delta(\hbar\omega + \hbar\Omega(\mathbf{Q})), \quad (31)$$

где $\pm\mathbf{Q} = \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}$; $\boldsymbol{\tau}$ — волновой вектор обратной решетки. С учетом (29) — (31) получим из (23) сечение спин-волнового рассеяния медленных нейтронов:

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE}\right)_{\text{s.w.}} = \frac{k}{k_0} \frac{(2\pi)^3}{v_0} \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2 |F(q)|^2 \frac{1}{4} \{1 + (\widetilde{\mathbf{q}}\mathbf{m})\} \langle S^z \rangle \times \times \sum_{\mathbf{Q}} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \{n(\Omega(\mathbf{Q}))\, \delta(\hbar\omega + \hbar\Omega(\mathbf{Q}))\, \delta(\mathbf{Q} + \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) + + [n(\Omega(\mathbf{Q})) + 1]\, \delta(\hbar\omega - \hbar\Omega(\mathbf{Q}))\, \delta(\mathbf{q} - \mathbf{Q} - \boldsymbol{\tau})\}, \quad (32)$$

где

$$\langle S^z \rangle = \frac{N\Delta}{U}; \quad n(\Omega) = [\exp(\beta\hbar\Omega) - 1]^{-1}.$$

Сечение рассеяния (32) в точности совпадает с сечением рассеяния на спиновых волнах для модели Гейзенберга, вычисленным в приближении хаотических фаз (см., например, [4]).

Однако для модели Хаббарда (11), как это следует из уравнений (27), (29), в области энергий, где электрон в состоянии преодолеть энергетический барьер, связанный с переворотом спина в эффективном поле, должно наблюдаться рассеяние нейтронов на стонеровских модах [3]:

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE}\right)_{\text{s.p.}} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2 \frac{k}{k_0} \frac{1}{4} |F(q)|^2 \{1 + (\widetilde{\mathbf{q}}\mathbf{m})^2\} \times \times \sum_{\sigma \neq \sigma'} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma}(1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'})\, \delta(E(\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma') - E(\mathbf{k}\sigma - \hbar\omega)). \quad (33)$$

Таким образом, неупругое рассеяние нейтронов происходит в данном случае вследствие возбуждения переходов $|\mathbf{k}\sigma\rangle \rightarrow \rightarrow |\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'\rangle$. Ферромагнитные переходные металлы имеют хорошо выраженные пики неупругого рассеяния на спиновых волнах. Для многих металлов закон дисперсии Dq^2 измерен с большой точностью. На рис. 4 приведены результаты нейтронных измерений для Ni. По своему характеру сечение рассеяния на стонеровских возбуждениях (33) сильно отличается от сечения рассеяния на спиновых волнах. Стонеровское рассеяние согласно (33) должно приводить к сильно размытым диффузным пикам малой интенсивности. Поскольку такие возбуждения не возникают в модели Гейзенберга, то их непосредственное обнаружение с помощью неупругого рассеяния нейтронов являлось бы важнейшим аргументом в пользу модели Хаббарда. Это тем более актуально, что существует большое число косвенных данных о их существовании. Мы обсудим эти данные в следующих разделах.

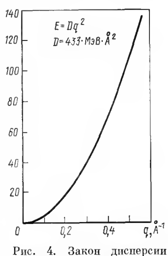


Рис. 4. Закон дисперсии спиновых волн в Ni [99]

4. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НИКЕЛЯ, ЖЕЛЕЗА И КОБАЛЬТА

Обсудим теперь кратко результаты некоторых экспериментальных и теоретических исследований ферромагнитных переходных металлов — Ni, Fe и Co. Общий обзор проблемы с различных точек зрения хорошо изложен в [27—30].

Никель. Наиболее подробно исследован никель. Температура Кюри T_k (Ni) = 631 К [2]. Средний атомный магнитный момент для ферромагнитного состояния кристалла, выраженный в магнетонах Бора [31]: μ (Ni) = 0,583 (данные для комнатной температуры). Мотт одним из первых предположил, что наблюдаемые дробные магнитные моменты связаны с тем, что энергия Ферми лежит в пределах $3d$-зоны. При этом энергия Ферми должна лежать на таких уровнях в Ni, Fe и Co, где число дырок в $3d$-зоне могло быть 0,6 в Ni, 1,7 в Co и 2,2 в Fe; это объясняет экспериментальные значения магнитного момента. Что может дать информация о средних атомных магнитных моментах для решения интересующего нас вопроса «локализованные — коллективизированные» электроны? Средний атомный магнитный момент является статической характеристикой. Теоретический расчет его обеспечивает хорошую

проверку для волновых функций электронов в металле [32, 33]. Степень локализации (или коллективизации) магнитоактивных электронов характеризуется лишь по тому, какой вклад в средний момент вносят электроны, близкие ко дну или к верху зоны. Этого, однако, недостаточно, чтобы высказаться в пользу той или иной микроскопической модели (см. Введение).

Вычисление температурной зависимости электронной теплоемкости для ферромагнитных металлов впервые было выполнено Стонером [34] на основе зонной модели в приближении эффективного поля и для параболической кривой плотности состояний. Этот расчет был усовершенствован Хантом [35], а впоследствии Шимицу и Терао [36] для случая никеля и железа. Низкотемпературную магнитную теплоемкость никеля вычислил также Томпсон [37]. Было показано, что в области низких температур спин-волновая теплоемкость, вычисленная в приближении невзаимодействующих спиновых волн, не вполне удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными. Согласие удается улучшить [38] за счет подбора плотности состояний никеля, опирающегося на детальные теоретические расчеты зонной структуры [39—42]. Наилучшее согласие с экспериментом дают, однако, расчеты [36], выполненные на основе модели Стонера для никеля и железа. В этой модели существуют только стонеровские возбуждения, которые в расчете Томпсона [37, 38] не принимаются во внимание. По мнению Шимицу и Терао [36] для правильного объяснения магнитной электронной теплоемкости при расчете должен учитываться вклад как от спин-волновых, так и от стонеровских возбуждений.

За последние годы было выполнено довольно большое количество теоретических расчетов зонной структуры ферромагнитного никеля [39—54]. На основе этих расчетов удалось удовлетворительно объяснить ферромагнитные энергии анизотропии никеля и железа [55], внутренние поля в никеле и железе и изомерный сдвиг железа [48], спин-волновые энергии железа, кобальта и никеля [52]; фактор спектроскопического расщепления и магнитомеханическое отношение никеля и железа [56] и целый ряд других характеристик. Наше понимание энергетической зонной структуры Ni, Fe и Co было уточнено благодаря изучению рентгеновских спектров [57], измерению спиновой поляризации электронов, туннелирующих из ферромагнетиков [58—60], и фотоэмиссионным исследованиям [61—64]. Экспериментальное изучение фотоэмиссионных электронов позволяет, в частности, определить зонное расщепление Δ. Для Ni наилучшая оценка по совокупности экспериментальных и теоретических исследований $\Delta \approx 0,5 \pm 0,1$ эВ. Фотоэмиссионные эксперименты, однако, не позволяют установить вклад от различных типов возбуждений. Косвенные доказательства существования стонеровских возбуждений дают также

исследования эффекта де Гааза-ван Альфвена в переходных $3d$-металлах [65, 66]. В работе [67] отмечалось, что точное описание комбинационного рассеяния света в переходных металлах требует учета добавочного рассеяния на стонеровских возбуждениях. При малых импульсах и нулевой температуре интенсивность рассеяния света на магнонах больше, чем на стонеровских возбуждениях. Однако вклад в интенсивность рассеяния света от магнонов и от стонеровских возбуждений по-разному зависит от специфики зонной структуры металла [68].

Железо. Температура Кюри T_k (Fe) = 1043 K [2]. Средний атомный магнитный момент для ферромагнитного состояния μ (Fe) = 2,177 [31]. Исследование температурной зависимости электронной теплоемкости железа [36] говорит о важности вклада от стонеровских возбуждений. Расчеты энергетической зонной структуры железа [69—73] позволили углубить наше понимание его магнитных свойств. Изучение поверхности Ферми железа [74—77] и никеля [74], спин-орбитальной связи и оптической проводимости железа [77] показывает очень хорошую применимость модели коллективизированных электронов. Исследования температурной зависимости обменного расщепления в железе [65] с помощью эффекта де Гааза — ван Альфвена дают указания на важность вклада от стонеровских возбуждений.

Тем не менее единого мнения по поводу того, почему железо магнитно, все еще нет. Авторы работы [78] задают вопрос: должны ли магнитные свойства железа описываться на основе представления о локализованных моментах или на основе зонного описания как в модели Стонера. В этой работе изучались сверхтонкие поля в сплавах FeSi и FeMn. В целом информация о состоянии магнитоактивных электронов в Fe, получаемая из измерения сверхтонких полей, проанализирована в обзоре [79]. Авторы работ [78, 79] убедительно показывают, что электроны в Fe отчасти сохраняют локализованный характер, и поэтому простая модель Стонера неприменима. Модель Хаббарда, учитывающая оба аспекта поведения электронов: коллективизированный и локализованный, значительно более адекватно описывает реальную ситуацию в металле; в этой модели коллективизированный и локализованный аспекты поведения электронов носят дополнительный характер.

Кобальт. Температура Кюри T (Co) = 1403 K [2]. Средний атомный магнитный момент μ (Co) = 1,707 [31]. Электронная энергетическая зонная структура кобальта была рассчитана в работах [80—83]. На основе этих расчетов дана простая интерпретация фотоэлектронных измерений в никеле и кобальте [84], а также интерпретация измерений сверхтонких полей [85]. Исследования низкотемпературной электронной теплоемкости позволили определить коэффициент γ [86]. Значение обменного расщепления кобальта больше, чем у никеля Δ (Co) = 0,91 эВ [80]. При этом

показательно то, что отношение эффективного кулоновского взаимодействия U к ширине d-зоны у всех трех металлов Fe, Ni, Co приблизительно одинаково: $U/w \approx 0{,}14$—$0{,}16$.

В работе [87] зонная модель была использована для вычисления температуры Кюри Co. Энергетическая зонная структура, волновые функции и плотность состояний находились из первых принципов. Полученное теоретическое значение $T_k \approx 1370 \pm \pm 200$ K. Оценка для Co температуры перехода на основе модели локализованных спинов Гейзенберга дает завышенное значение, а именно $T_k \approx 1870$ K. Перейдем теперь к обсуждению данных о спектре магнитных возбуждений и намагниченности.

5. СПЕКТР МАГНИТНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ Ni, Fe, Co

Очень важная информация о состоянии магнитоактивных электронов получена при исследовании спектра магнитных возбуждений. Наиболее интересные (с точки зрения сравнения локализованной и зонной моделей) исследования были проведены с помощью рассеяния нейтронов.

Рассеяние нейтронов в Ni детально исследовалось в ряде теоретических и экспериментальных работ [88—101]. Обзоры ранних нейтронных исследований спектра магнитных возбуждений в Ni даны в [95, 100, 101]; более поздние результаты обсуждаются в обзоре [30].

Метод рассеяния тепловых нейтронов позволяет непосредственно измерять закон рассеяния $S(q, \omega)$ в широком интервале значений переданных энергий $\hbar\omega$ и импульсов q:

$$q = k_0 - k = (m/\hbar)(v_0 - v); \quad m/\hbar = 0{,}3956\,\text{Å}^{-1}\,\text{см}^{-1}\cdot\text{мс};$$
$$\hbar\omega = (\hbar^2/2m)(k_0^2 - k^2) = (1/2)\,m\,(v_0^2 - v^2); \quad \hbar^2/2m = 2{,}072\ \text{МэВ}\cdot\text{Å}^{-2}.$$

С помощью рассеяния тепловых нейтронов можно в принципе исследовать область значений q в интервале $0{,}1$—10 Å^{-1} и энергий $\hbar\omega$ в интервале 10—10^3 МэВ.

При изучении рассеяния нейтронов в переходных металлах можно в первом приближении пренебречь вкладом орбитального момента [102]. Для Ni расчет показывает [96], что при больших передачах импульса и энергий значение орбитального вклада возрастает. Ферромагнитные металлы имеют хорошо выраженные пики неупругого рассеяния на спиновых волнах. Для Ni, Fe, Co закон дисперсии

$$\hbar\omega = Dq^2(1 - \beta q^2 + \gamma q^4) \tag{34}$$

измерен с большой точностью. Результаты нейтронных измерений для Ni приведены на рис. 4. Заметим, что в ряде работ [103—106] спектр спин-волновых возбуждений, измеряемый с помощью рас-

сеяния нейтронов, интерпретировался на основе модели Гейзенберга. Эксперименты проводились на Ni [104] и Fe [104—106]. Однако последующие исследования спектра спиновых волн в Fe [107—111] и Co [90, 100, 112, 115] показали, что коллективизированная модель более соответствует действительности. Решающим аргументом в пользу коллективизированной модели было косвенное указание на существование стонеровских возбуждений.

Было обнаружено [99], что в Ni спин-волновая интенсивность рассеяния нейтронов вдоль направления [110] медленно спадает

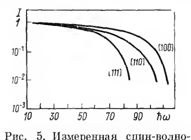


Рис. 5. Измеренная спин-волновая интенсивность в Ni при комнатной температуре вдоль трех симметричных направлений [99]

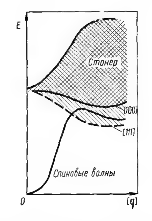


Рис. 6. Результаты теоретического расчета спектра возбуждений для Ni [98] в направлении [111]

с увеличением энергии и при значении $E \approx 100$ МэВ резко уменьшается более чем на порядок. Такое внезапное уменьшение интенсивности было объяснено пересечением спин-волнового спектра и стонеровского континуума. Значение энергии, при котором происходило уменьшение интенсивности, оказалось различным для трех главных симметричных направлений (80 МэВ для направления [111] и 110 МэВ для направления [100]) (рис. 5).

Расчеты обобщенной восприимчивости $X^{+-}(q, \omega)$ и ее полюсов, проведенные на основе вычисления зонной энергетической структуры Ni [98] с учетом зависимости зонного спинового расщепления от квазиимпульса и многозонных эффектов, показали, что вдоль направления [111] область стонеровских возбуждений находится ниже, чем вдоль двух других направлений (рис. 6), что согласуется с экспериментом. Подобное же поведение спин-волновой интенсивности наблюдается и в Fe [109] с тем отличием, что значения энергий спада $E \approx 90$ МэВ для направления [100], $E \approx 95$ МэВ для [110] и $E \approx 100$ МэВ для [111].

Как для Ni [95, 99], так и для Fe [110] были проведены детальные нейтронные измерения температурной зависимости спектра магнитных возбуждений. Ожидалось, что с изменением темпера-

туры стонеровский континуум будет сдвигаться, поскольку должно измениться значение зонного расщепления Δ, пропорциональное намагниче́нности. Измерения в Ni [99] вдоль направления [111] показали, что точка пересечения спин-волнового и стонеровского спектра практически не меняется в интервале температур от 4,2 до 715 К (рис. 7). Более того спин-волновой спектр в этом температурном интервале также изменяется незначительно. Коэффициент жесткости D в законе дисперсии $\hbar\omega = Dq^2$ уменьшался от

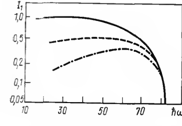


Рис. 7. Температурная зависимость спин-волновой интенсивности в Ni [99]

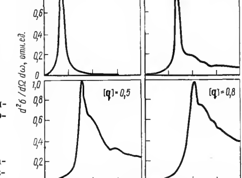


Рис. 8. Теоретический расчет зависимости полного сечения рассеяния в Ni от квазиимпульса [98]

555 МэВ Å^2 при 4,2 К до 280 МэВÅ^2 при $T_h = 631$ К; при дальнейшем увеличении температуры до 715 К коэффициент D практически не изменялся.

Эти результаты были получены с помощью трехосного спектрометра. Техника малоуглового рассеяния [107] дает другое значение $D = 125$ МэВ Å^2 при $T = T_h$. Однако независимо от этих расхождений выполняется условие $D(T) \to D_0$ при $T \to T_h$. Подобное же температурное поведение наблюдается и для Fe [110]. Для измерений использовались кристаллы ^{60}Ni и (^{54}Fe + Si). Изотопы ^{60}Ni и ^{54}Fe имеют очень малую ядерную амплитуду рассеяния по сравнению с нормальными изотопами. При этом фононное рассеяние здесь меньше и ядерное некогерентное рассеяние дает малый вклад.

Таким образом, можно говорить о том, что эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов в переходных металлах дают важные косвенные указания на существование стонеровских возбуждений. Подробные теоретические расчеты [98] поддерживают этот вывод.

Каковы перспективы непосредственного исследования стонеровских возбуждений? Важнейшим следствием расчетов, проведенных в [98], является утверждение, что в области больших передач импульса спин-волновое сечение рассеяния всего в два-три раза больше стонеровского сечения рассеяния (рис. 8). Можно дать очень простую качественную интерпретацию этого обстоятельства [24, 25], которая основывается на результатах теоретического расчета Томпсона [116]. Томпсон рассматривал модель Хаббарда, исходя из правила сумм (20):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{Im} X^{+-}(q,\ \omega) = (2\pi/\hbar)(n_{\downarrow} - n_{\uparrow})$$

и использовал приближение хаотических фаз для расчета восприимчивости и приближение эффективной массы. Численным образом он показал, что имеет место равенство

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Im} X_0^{+-}(q = 0{,}9q_{\text{макс}},\ \omega) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{\Delta}{U} - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Im} X_{\text{s.w.}}^{+-}(q = 0{,}9q_{\text{макс}},\ \omega) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{\Delta}{U}\left(1 - \frac{1}{2}\right) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{\Delta}{2U}. \qquad (35)$$

При этом Томпсоном было получено, что для сильного ферромагнетика ($\Delta > \varepsilon_f$, что соответствует Ni) свободная восприимчивость

$$\operatorname{Im} X_0^{+-}(q,\ \omega) = \begin{cases} 0, & |y| > 1; \\ \frac{3}{4}\pi\frac{\Delta}{U\delta E}(1 - y^2), & |y| < 1, \end{cases}$$

где $y = (\Delta' - \omega)/\delta E$, $\Delta' = \Delta + \hbar^2 q^2/2m^*$ и $\delta E = \hbar^2 q k_f/m^*$; m^* — эффективная масса электрона. Таким образом, ширина диффузного пика, определяемая $\operatorname{Im} X_0^{+-}(q,\ \omega)$, будет $\delta E = (q/k_f)\ \varepsilon_f$.

Оценим величину δE. Следуя Маттису [117], примем, что $q_{\text{макс}} \leqslant 0{,}75k_f$. Тогда для $q = 0{,}9q_{\text{макс}}$ найдем, что $\delta E \approx 0{,}67\varepsilon_f$. Точные расчеты ε_f для металлического Ni [50] показывают, что $\varepsilon_f = 7{,}6$ эВ. Однако для оценки $\operatorname{Im} X_0^{+-}$ в рамках расчета Томпсона, чтобы не нарушать «самосогласованности» приближений, воспользуемся оценками ε_f для так называемой модели эквивалентного свободного электронного газа в парамагнитной области [95]. В рамках этой модели, отвечающей приближениям работы [116], $\varepsilon_f = 0{,}4$ эВ. Таким образом, ширина стонеровского диффузного пика $\delta E = 0{,}67\varepsilon_f = 0{,}67 \cdot 0{,}4 = 0{,}27$ эВ. Ширину спинволнового пика при $q = 0{,}9q_{\text{макс}}$ можно принять равной 0,1 эВ [94, 95, 99, 100]. Поскольку согласно формуле (35) площади обоих

8—01068

пиков равны для $q = 0{,}9q_{макс}$, следовательно, амплитуда стонеровского пика будет примерно в 3 раза меньше амплитуды спин-волнового пика. Таким образом, проведенные качественные оценки находятся в согласии с точными численными расчетами (рис. 8) работы [98].

Измерения спектра магнитных возбуждений в Ni [99] и Fe [109, 110] были выполнены на стационарных реакторах при помощи трехосного кристаллического спектрометра. Зонное расщепление Δ Ni, Fe и Co имеет наименьшее значение для Ni $\Delta \approx$ $\approx 0{,}5$ эВ. Поэтому для измерения стонеровских возбуждений в Ni необходим поток нейтронов с энергией в интервале 0,1—1 эВ. Напомним, что точке окончания спин-волнового спектра вдоль направления [111] соответствует энергия 80 МэВ, поэтому интересующая нас область передачи энергий заключена в интервале 0,08—0,5 эВ.

Ясно, что обычная техника мало подходит для измерения возбуждений столь высокой энергии даже при наличии горячего источника. Многообещающим методом является метод времени пролета. Импульсные источники нейтронов имеют необходимую мощность для обеспечения достаточной светосилы, а малая ширина импульса позволяет работать при хорошем разрешении и низком уровне фона. Согласно оценкам работы [118] при $E_0 = 0{,}5$ эВ и $\Delta E_0 = 0{,}0045$ эВ, времени вспышки $\tau = 3$ мкс и размерах замедлителя 20×20 см поток нейтронов, ожидающийся на расстоянии 30 м от ИБР-2, можно считать равным

$$J = 2{,}5 \cdot 10^4 \text{ нейтр./(см} \cdot \text{с}^2).$$

В работе [24] были проведены оценки скорости счета установки при рассеянии такого потока медленных нейтронов на стонеровских возбуждениях. При этом использовались те оценки для стонеровского сечения рассеяния, которые обсуждались выше. Был получен следующий результат: ожидаемое число отсчетов за время измерения $t = 24$ ч $N \approx 200$—250 нейтр./сут. Аналогичные оценки для мощного импульсного источника нейтронов ZING [119] дают $N \approx 160$ нейтр./сут. Таким образом, можно говорить, что порядок величины $N \approx 10^2$ нейтр./сут.

Приведенные оценки сверху соответствуют высокой разрешающей способности, позволяющей детально исследовать свойства стонеровских возбуждений. Если же целью эксперимента является простое обнаружение их существования, то достаточно работать с разрешением в десять раз хуже. При этом интенсивность вырастет на порядок и скорость счета повысится.

На имеющихся в настоящее время установках непосредственно измерять стонеровские возбуждения в Ni, Fe, Co довольно трудно из-за большого значения зонного расщепления. Поэтому экспериментаторы стараются найти зонные ферромагнетики с неболь-

шим значением Δ. В работе [120] для исследования магнитных возбуждений выбрано интерметаллическое соединение MnSi, которое является слабым зонным ферромагнетиком. Ферромагнитное состояние в MnSi индуцируется внешним магнитным полем с напряженностью выше 6 кЭ. Эксперимент по рассеянию нейтронов был проведен с помощью трехосного кристаллического спектрометра.

В магнитном поле напряженностью 10 кЭ при температуре 5 К наблюдались хорошо определенные спин-волновые возбуждения ниже 2,5 МэВ. Закон дисперсии был найден в виде $\hbar\omega_q$ (МэВ) $= 0{,}13 + 52q^2(\mathrm{\AA}^2)$ для направления [100]. Выше 3 МэВ наблюдалось значительное уширение спин-волнового пика, что связывалось авторами с пересечением стонеровского континуума. Таким образом, коэффициент жесткости в MnSi на порядок меньше, чем в никеле. Зонное расщепление определить не удалось; была найдена только энергия пересечения стонеровского континуума. Для направления [100] эта энергия равна 2,6 МэВ.

Рассеяние нейтронов в Fe_3Al [121] также дает косвенное подтверждение существования стонеровских возбуждений. Для направления [111] энергия пересечения стонеровского континуума около 12 МэВ. В интерметаллическом соединении Pd_3Fe [122] кривая дисперсии магнонов в направлении [001] пересекает стонеровский континуум при $E \approx 40$ МэВ.

Итак, исследования спектра магнитных возбуждений ферромагнитных переходных металлов и некоторых их соединений дают очень веские аргументы в пользу того, что стонеровские возбуждения существуют и с развитием техники эксперимента их можно будет наблюдать непосредственно.

6. ВКЛАД СПИНОВЫХ ВОЛН И СТОНЕРОВСКИХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В НАМАГНИЧЕННОСТЬ

Большой интерес, с точки зрения сравнения локализованной и коллективизированной моделей, представляет изучение температурной зависимости намагниченности. К сожалению, до сих пор нет достаточной ясности в этом вопросе.

Вольфарт [27] проанализировал магнитные, тепловые и магнитоупругие свойства сильных и слабых зонных ферромагнетиков, исходя из простых термодинамических соображений. По его мнению, свойства сильных зонных ферромагнетиков, в частности Ni, ниже точки Кюри в основном хорошо описываются на основе простой спин-волновой теории. Стонеровские возбуждения имеют существенное значение в описании слабых ферромагнетиков.

Более детальный анализ Шимицу [28] и в особенности Реди [123] показывает, что ситуация гораздо более сложная, чем это следует из работы [27].

Реди [123] анализирует совокупность экспериментальных данных по рассеянию нейтронов; намагниченности, ЯМР и пытается сделать заключение об относительном вкладе спиновых волн и стонеровских возбуждений в температурное поведение намагниченности $M(T)$.

В самом деле, температурная зависимость намагниченности существенно зависит от модели, которую будем использовать для описания. Для простого кубического ферромагнетика Гейзенберга температурная зависимость намагниченности в спин-волновом приближении имеет вид

$$\Delta M_{\text{s.w.}} = M(0) - M(T) \sim F(3/2T)\,(g\mu_B/M(0))\left(\frac{kT}{4\pi D(T)}\right)^{3/2} - O(T^{5/2}) = aT^{3/2}(1 + bT + \ldots). \quad (36)$$

Впервые коэффициенты a при члене $T^{3/2}$ для Ni и Fe были найдены в работе [124]. В зонном ферромагнетике, помимо спиновых волн, существуют также стонеровские возбуждения, которые также дают вклад в термодинамическое поведение. Поэтому в общем случае температурная зависимость $\Delta M(T)$ должна определяться вкладом от спиновых волн и стонеровских возбуждений, а также от их взаимодействия.

В некоторой области значений параметров системы $\Delta M(T)$ можно приближенно представить в виде суперпозиции этих двух вкладов:

$$\Delta M(T) \sim \Delta M_{\text{s.w.}} + \Delta M_{\text{s.p.}}. \quad (37)$$

Температурная зависимость $\Delta M_{\text{s.p.}}(T)$ отличается для слабого и сильного ферромагнетиков (см. [123]):

$$\Delta M_{\text{s.p.}}(T) = \left\{ \begin{array}{ll} \sigma_{00}\,[2I(T)/n]\exp(-\Delta/kT) & \text{— сильный ферромагнетик;} \\ \sigma_{00}AT^2 & \text{— слабый ферромагнетик.} \end{array} \right. \quad (38)$$

Более точный расчет Херринга [125] с учетом взаимодействия спиновых волн с одночастичными возбуждениями дает для слабого ферромагнетика следующее выражение:

$$\Delta M_{\text{s.p.}}(T) = AT^2 - CT^{5/2}. \quad (39)$$

Таким образом, исследование температурной зависимости намагниченности в принципе может дать важные аргументы в пользу справедливости той или иной модели. Дело, однако, осложняется тем, что для надежных заключений необходима очень большая точность измерений, поскольку $\Delta M(T)$ очень мала в низкотемпературной области.

В последние годы были проведены подробные теоретические и экспериментальные исследования температурной зависимости

намагниченности Ni [124, 126—130] и Fe [124, 128, 131—134]. Анализ данных по рассеянию нейтронов, измерению намагниченности и ЯМР показывает, что Ni и Fe ведут себя по-разному. Низкотемпературная намагниченность Fe хорошо описывается формулой

$$\Delta M(T) = B_0 T^{3/2}, \tag{40}$$

где B_0 — константа (в согласии со спин-волновой теорией).

Как следует из (36), измеряя с помощью неупругого рассеяния нейтронов спин-волновую жесткость D, можно найти коэффициент B_0. Для Fe все три значения B_0, получаемые с помощью неупругого рассеяния нейтронов, измерения намагниченности, ЯМР, хорошо согласуются между собой.

При более высоких температурах коэффициент B в (40) зависит от температуры. Для модели Хаббарда расчет коэффициента спин-волновой жесткости в приближении Хартри — Фока приводит к следующей температурной зависимости [4]:

$$D(T) = D_0 - D_1 T^2 - D_2 T^{5/2}. \tag{41}$$

Вклад в $D(T)$, пропорциональный T^2, возникает за счет учета электрон-магнонного взаимодействия. Стрингфеллоу [107] с помощью техники малоуглового рассеяния измерил $D(T)$ для Ni и Fe. Было найдено, что $D_1 = 0$ для Ni. Для Fe $D_1 \neq 0$ в низкотемпературной области и зависимость D от T^2 существенна. Таким образом, температурная зависимость спин-волновой жесткости для Ni имеет вид

$$D = D_0 - D_1 T^{5/2}. \tag{42}$$

Согласно Альдреду наилучшие значения D для Ni: $D(T = 4{,}2\ \text{K}) = 555\ \text{МэВ}\cdot\text{Å}^2$ и $D(T = 295\ \text{K}) = 455\ \text{МэВ}\cdot\text{Å}^2$. На основе этих значений, полученных с помощью рассеяния нейтронов, можно определить коэффициент B температурной зависимости намагниченности (40).

Оказалось, что для Ni величина B, полученная из измерений намагниченности и ЯМР, примерно на 30—40% меньше, чем то значение, которое дают нейтронные эксперименты. Альдред [129] высказал предположение, что такое резкое различие в поведении Ni и Fe можно объяснить тем, что низкотемпературное поведение Fe удовлетворительно описывается спин-волновой картиной, но для Ni необходимо учитывать вклад от стонеровских возбуждений. Поэтому Альдред рассмотрел добавочный стонеровский вклад в намагниченность Ni:

$$\Delta M_{\text{s.p.}}(T) = \Delta M(T) - \Delta M(T)_{\text{s.w.}}. \tag{43}$$

Измеренную температурную зависимость $\Delta M(T)$ он попытался описать на основе выражения (38). К сожалению, точность изме-

рений [129] не позволила отдать предпочтение какой-либо из возможностей в (38). Обе зависимости $\Delta M_{\text{s.p.}}$ не вполне удовлетворительно ложатся на экспериментальную кривую, хотя зависимость AT^2 все же несколько лучше приближает ее.

Реди [130] определил вклад $\Delta M_{\text{s.p.}}$ для Ni с помощью техники ЯМР. Его результат имеет вид

$$\Delta M_{\text{s.p.}} = 1{,}68\cdot 10^{-6} T^{3/2} + 3{,}22\cdot 10^{-7} T^2. \qquad (44)$$

Реди показал, что член, пропорциональный T^2, не зависит от $D\ (T)$ во всей области экспериментальных значений спин-волновой жесткости. Поэтому, считает Реди [123, 130], можно связать зависимость T^2 в (44) с вкладом стонеровских возбуждений. Анализ Реди показывает, что выражение (39) хуже согласуется с экспериментом, чем простая зависимость T^2.

Несомненно, результаты работ [123—134] имеют очень большое значение, хотя не вносят полной ясности. Из (44) следует, что величина $\Delta/k \neq 0$ очень мала, поскольку Ni является сильным ферромагнетиком [135]. Измерения намагниченности дают $\Delta/k = 162$ К [130]. Реди полагает, что это значение должно быть, по крайней мере, на порядок меньше, чтобы объяснить наблюдаемое расхождение с нейтронными данными.

Таким образом, для окончательного суждения о вкладе стонеровских и спин-волновых возбуждений нужны дополнительные очень точные эксперименты. Ясно, однако, что для Ni только спин-волнового описания недостаточно. Надеяться, что будет достигнута необходимая точность измерений температурной зависимости намагниченности, достаточная для однозначных выводов, трудно, поскольку оба вклада входят аддитивным образом. Вот почему мы считаем, что только метод рассеяния медленных нейтронов может дать надежную и прямую информацию о стонеровских возбуждениях [136].

7. НЕКОТОРЫЕ ОБОБЩЕНИЯ МОДЕЛИ ХАББАРДА

При обсуждении экспериментальных данных по рассеянию медленных нейтронов в ферромагнетиках необходимо учитывать приближенный характер теоретических предсказаний, обсуждавшихся выше. До сих пор речь шла о спектре возбуждений однозонной модели Хаббарда. На самом деле в реальном металле ситуация может быть сложнее. Уже для двухзонной модели картина неупругого рассеяния нейтронов качественно и количественно модифицируется; при этом стонеровское сечение рассеяния может стать заметным и для не слишком больших $q < q_{\text{макс}}$.

Спектр магнитных возбуждений двухзонной модели Хаббарда [137] показан на рис. 9. В отличие от однозонной модели возникают четыре квазистонеровских континуума, связанные с перехода-

ми внутри одной зоны и между зонами, а также ветвь оптических спиновых волн и так называемая межзонная спин-волновая ветвь. Таким образом, модель коллективизированных электронов обладает весьма богатым спектром возбуждений в «оптической» области.

1. Важным обобщением однозонной модели Хаббарда является модель Хаббарда с (s — d)-гибридизацией, описывающей прямое рассеяние электронов s- и d-зон [138]:

$$H=\sum_{ij\sigma} t_{ij}d^{+}_{i\sigma}d_{j\sigma}+\frac{U}{2}\sum_{i\sigma} n_{i\sigma}n_{i-\sigma}+$$

$$+\sum_{k} E(k)\, a^{+}_{k\sigma}a_{k\sigma}+\sum_{ik\sigma}(V_{ik}d^{+}_{i\sigma}a_{k\sigma}+\text{э.с.}). \tag{45}$$

Существование широкой зоны s-электронов неявно учитывается и в обычной однозонной модели Хаббарда при реалистических оценках параметра кулоновского отталкивания. Поскольку скорость перескока d-электронов с атома на атом значительно меньше характерной скорости электронов проводимости, последние могут эффективно коррелировать с d-электронами и экранировать их поля. Для переходных 3d-металлов исследование энергетической зонной структуры показывает важную роль процессов s — d-гибридизации. Займан показал [139], что для благородных и переходных металлов в рамках применимости метода ККР d-зона фактически является резонансом в широкой sp-зоне. Это позволяет предположить, что уширение атомных d-уровней может проистекать из-за s — d-гибридизации, конкурируя с прямым перекрытием волновых функций d-электронов. Эта точка зрения получила подтверждение в работах [140—143]. Впоследствии прямые расчеты на основе интерполяционных схем [144] показали, что интегралы перекрытия волновых функций d-электронов могут быть меньше, чем интегралы перекрытия волновых функций s- и d-электронов, хотя отличие не слишком значительно.

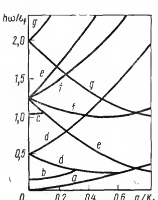


Рис. 9. Спектр возбуждений двухзонной модели Хаббарда, рассчитанный в [137]

Таким образом, в ряду других обобщений модели Хаббарда, более соответствующих реальной ситуации в чистых переходных металлах, модель с s — d-гибридизацией занимает одно из главных мест. Одночастичные свойства различных вариантов этой модели были исследованы в [145—148]. Спин-волновой полюс

обобщенной спиновой восприимчивости для модели (45) вычислялся в [149] в атомном пределе для d-электронов и для очень сильной $s-d$-гибридизации. Однако эти приближения совершенно неприменимы для реальных переходных металлов. Подробная теория рассеяния медленных нейтронов для модели Хаббарда с $s-d$-гибридизацией приведена в [150]; данный расчет является прямым обобщением работы Изюяма, Кима и Кубо [26]. Они показали, что для однозонной модели Хаббарда, пренебрегая перекрытием волновых функций на разных узлах, можно выразить обобщенную спиновую поперечную восприимчивость $X^{+-}(q, \omega)$ системы через хартри-фоковскую восприимчивость $X_0^{+-}(q, \omega)$ в виде (24).

Хартри-фоковская восприимчивость системы (45) вычисляется с помощью простого (u, v)-преобразования линеаризованного гамильтониана

$$H^{HF}=\sum_{k\sigma}\widetilde{E}_\sigma(k)\,d^+_{k\sigma}d_{k\sigma}+\sum_{k\sigma}\varepsilon_k a^+_{k\sigma}a_{k\sigma}+\sum_{k\sigma}(V_k a^+_{k\sigma}d_{k\sigma}+\text{э.с.}) \quad (46)$$

к следующему виду:

$$H^{HF}=\sum_{k\sigma}\{\omega_{1k\sigma}\alpha^+_{k\sigma}\alpha_{k\sigma}+\omega_{2k\sigma}\beta^+_{k\sigma}\beta_{k\sigma}\}. \quad (47)$$

Здесь

$$\omega^{1}_{2k\sigma}=\frac{1}{2}\{(\widetilde{E}_\sigma(k)+\varepsilon_k)\pm\sqrt{(\widetilde{E}_\sigma(k)-\varepsilon_k)^2+4|V_k|^2}; \quad (48)$$

$$\widetilde{E}_\sigma(k)=E(k)+\frac{U}{N}\sum_p n_{p\sigma}.$$

Выражение для мнимой части хартри-фоковской восприимчивости записывается в форме [150]:

$$\begin{aligned}\operatorname{Im}X^{HF}(q,\omega)=&-\pi(g\mu_B)^2\frac{1}{N}\sum_k\{u^2_{k+q\downarrow}u^2_{k\uparrow}(n^\alpha_{k\uparrow}-n^\alpha_{k+q\downarrow})\times\\&\times\delta(\hbar\omega+\omega_{1k+q\downarrow}-\omega_{2k\uparrow})+\\&+v^2_{k+q\downarrow}v^2_{k\uparrow}(n^\beta_{k\uparrow}-n^\beta_{k+q\downarrow})\,\delta(\hbar\omega+\omega_{2k+q\downarrow}-\omega_{2k\uparrow})+\\&+u^2_{k+q\downarrow}v^2_{k\uparrow}(n^\beta_{k\uparrow}-n^\alpha_{k+q\downarrow})\,\delta(\hbar\omega+\omega_{1k+q\downarrow}-\omega_{2k\uparrow})+\\&+v^2_{k+q\downarrow}u^2_{k\uparrow}(n^\alpha_{k\uparrow}-n^\beta_{k+q\downarrow})\,\delta(\hbar\omega+\omega_{1k+q\downarrow}-\omega_{2k\uparrow})\}. \quad (49)\end{aligned}$$

Таким образом, стонеровское сечение рассеяния медленных нейтронов

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\,dE}\right)_{\text{s.p.}}=\left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2}\right)^2\frac{1}{4}\,|F(q)|^2\frac{k'}{k}\,(1+\widetilde{q}^2_z)\,\frac{N}{\pi(g\mu_B)^2}\times$$
$$\times\{(n(\omega)+1)\operatorname{Im}X^{HF}(-q,\omega)+n(-\omega)\operatorname{Im}X^{HF}(q,\omega)\} \quad (50)$$

будет описывать рассеяние на четырех квазистонеровских континуумах.

Чтобы рассчитать обобщенную спиновую восприимчивость от поперечных спиновых компонент для модели (45), необходимо вычислять двухвременную функцию Грина $\langle\langle \Theta_k(q) = d^+_{k+q\downarrow} d_{k\uparrow} | B \rangle\rangle_\omega$. Цепочка уравнений для функций Грина сводится к замкнутой системе четырех уравнений с помощью следующего приближения хаотических фаз:

$$[\Theta_k(q),\ H_d] \approx (E(k) - E(k+q))\,\Theta_k(q) + \\ + \Delta\Theta_k(q) - \frac{U}{N}\sum_p (n_{k+q\downarrow} - n_{k\uparrow})\,\Theta_p(q);$$

$$[d^+_{k+q\downarrow} a_{k\uparrow},\ H_d] \approx -E(k+q)\,d^+_{k+q\downarrow} a_{k\uparrow} - \frac{U}{N}\sum_p n_{p\uparrow} d^+_{k+q\downarrow} a_{k\uparrow} + \\ + \frac{U}{N}\langle d^+_{k\uparrow} a_{k\uparrow}\rangle \sum_p d^+_{p+q\downarrow} d_{p\uparrow}.$$

В результате выражение для поперечной спиновой восприимчивости $X^{-+}(q,\ \omega)$ запишется в виде, аналогичном (24):

$$X^{-+}(q,\ \omega) = X^{HF}(q,\ \omega)\,\{1 - U/(g\mu_B)^2\, X^{HF}(q,\ \omega)\}^{-1}. \qquad (51)$$

Здесь восприимчивость в приближении Хартри — Фока $X^{HF}(q,\ \omega)$ имеет сложный вид (см. [150]) и в пределе $V_{ik} \to 0$ переходит в обычное выражение (25). Поскольку гамильтониан (45) остается ротационно-инвариантным, то в силу общей теории Эдвардса (17) восприимчивость (51) должна иметь спин-волновой полюс. Наличие спин-волнового полюса у восприимчивости $X^{-+}(q,\ \omega)$ показано в [150]. При этом имеем

$$\operatorname{Im} X^{-+}(q \to 0,\ \omega \to 0) \sim -\pi\,(g\mu_B)^2\, b/U\,\delta(\hbar\omega - \hbar\Omega_q), \qquad (52)$$

где b — некоторая константа, определяемая численным образом. Сечение неупругого рассеяния нейтронов на спиновых волнах записывается в данном случае совершенно аналогично (32).

2. В зонной модели магнетизма, как и в локализованной модели, большой интерес представляет учет в явном виде электрон-фононного взаимодействия. Благодаря этому взаимодействию происходит неупругая передача энергии от системы магнитных электронов колебаниям решетки; при детальном описании рассеяния нейтронов это обстоятельство имеет существенное значение [151].

Электрон-фононное взаимодействие определяется изменением потенциалов ионов решетки $v(\mathbf{R})$ при учете их тепловых колебаний:

$$H_{e-ph} = \sum_{l r_i} \{v(\mathbf{R}_l - \mathbf{r}_i) - \langle v(\mathbf{R}_l - \mathbf{r}_i)\rangle_{ph}\}, \qquad (53)$$

где координаты ионов $\mathbf{R}_l = \mathbf{l} + \mathbf{u}_l$; $\mathbf{l}$ — равновесные положения; $\mathbf{u}_l$ — тепловые смещения; $\mathbf{r}_i$ — координаты электронов. В [151] блоховские функции определены по усредненному по колебаниям решетки потенциалу ионов $v(\mathbf{l} - \mathbf{r}) = \langle v(\mathbf{R} - \mathbf{r})\rangle_{ph}$

$$\left\{-\frac{1}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + \sum_l \tilde{v}(\mathbf{l} - \mathbf{r})\right\}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (54)$$

Это определение отличается от обычного [см. (1) — (3)] и позволяет учитывать упругие процессы электрон-фононного рассеяния. В представлении вторичного квантования гамильтониан однозонной модели Хаббарда с учетом электрон-фононного взаимодействия записывается в виде [151]:

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph}; \quad (55)$$

$$H_{ph} = \sum_q \omega_q b_q^+ b_q; \quad (55а)$$

$$H_{e-ph} = \sum_{pq} V_{p,\ p+q} a_{p\sigma}^+ a_{p+q\sigma} \frac{1}{N} \times$$
$$\times \sum_l \exp(i\mathbf{q}\mathbf{l})\left(\exp(i\mathbf{q}\mathbf{u}_l) - \langle\exp(i\mathbf{q}\mathbf{u}_l)\rangle\right). \quad (55б)$$

Здесь H_e — однозонный гамильтониан Хаббарда (11); $v = U/N$ — энергия кулоновской корреляции в одном узле; $V = V_0 N$ — объем системы; b_q^+ и b_q — операторы рождения и уничтожения фононов с квазиимпульсом $\mathbf{q}$, поляризацией j и энергией ω_{qj}; $q = (\mathbf{q},\ j)$. Матричный элемент электрон-ионного взаимодействия имеет вид

$$V_{p,\ p+q} = v(q)\int d^3r\varphi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})\,\varphi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = v(q)\,F(q,\ p+q) \approx V_q,$$

где $v(q) = 1/V_0\int d^3r\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})\,v(\mathbf{r})$ — фурье-компонента электрон-ионного потенциала. Потенциал $v(\mathbf{R}_l - \mathbf{r})$ имеет смысл эффективного (экранированного электронами проводимости) потенциала взаимодействия магнитных электронов и ионов.

Н. М. Плакида и Л. С. Смирнов [151] для системы с гамильтонианом (55) вычислили сечение магнитовибрационного рассеяния при учете однофононного перехода:

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE'}\right)_{mv} = \sigma_{mv}(k)\frac{k'}{k}\left\{\exp[-2W(q)]\frac{(2\pi)^3}{MV_0}\sum_{\tau pj}\frac{(\mathbf{q}\mathbf{e}_{pj})^2}{2\omega_{pj}}\times\right.$$
$$\left.\times\left[n(\omega_{pj}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right]\delta(\mathbf{q} \pm \mathbf{p} - 2\pi\boldsymbol{\tau})\,\delta(\omega \pm \omega_{pj}).\right. \quad (56)$$

Здесь

$$\sigma_{mv}(k) = (\gamma r_0)^2(1 - e_z^2)\frac{1}{4}|F(k)|^2|V_q|^2\frac{1}{4}\left[\frac{1/N(\pi_\uparrow - \pi_\downarrow)}{1 - v^2\pi_\uparrow\pi_\downarrow}\right]^2 \quad (57)$$

— эффективное сечение магнитовибрационного рассеяния. Как видно, сечение рассеяния (56) имеет вид обычного однофононного ядерного рассеяния. Однако эффективное сечение (57) помимо обычных для упругого магнитного рассеяния множителей $((1 - e_z^2) \mid F(k) \mid^2)$ и квадрата намагниченности $(n_\uparrow - n_\downarrow)^2 \sim \sim (\pi_\uparrow - \pi_\downarrow)^2$, как и в модели локализованных спинов, дополнительно содержит квадрат матричного элемента электрон-фононного взаимодействия $\mid V_q \mid^2$, что позволяет оценить его по магнитовибрационному рассеянию нейтронов в металлах.

Электрон-фононное взаимодействие в модели Хаббарда рассматривалось также в [152—156]. Морковский [153] вычислил время релаксации магнонов вследствие взаимодействия с фононами во втором порядке теории возмущений. Джордж [154] с помощью метода двувременных температурных функций Грина получил выражение для ренормированной спин-волновой жесткости в приближении хаотических фаз. В работе Ямады [156] вычислялись время релаксации магнонов и ренормировка спин-волновой жесткости с помощью мацубаровских функций Грина в приближении хаотических фаз. Существенно, что в отличие от других авторов [154, 155] расчет Ямады [156] дает выражение для $\delta D \sim T^4$, которое согласуется с феноменологическим результатом Изюяма и Кубо [152]. Ямада [156] также дал численные оценки указанных величин для Ni и Fe.

3. С точки зрения рассеяния медленных нейтронов большой интерес представляет спектр магнитных возбуждений так называемой модели Зенера [157]. Гамильтониан модели Зенера записывается в виде

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U/2 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} - 2J \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i \mathbf{S}_i, \tag{58}$$

где $\sigma_i^+ = a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}$; $\sigma_i^- = a_{i\downarrow}^+ a_{i\uparrow}$; $\sigma_i^z = 1/2\,(a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow})$ — спиновые операторы коллективизированных электронов; $\mathbf{S}_i$ — оператор локализованного спина в узле i, отвечающий правилу Хунда. Перепишем гамильтониан (58) в k-представлении

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + UN^{-1} \sum_{kk'q} a_{k+q\uparrow}^+ a_{k\uparrow} a_{k'-q\downarrow}^+ a_{k'\downarrow} -$$

$$- JN^{-1/2} \sum_{kq} [a_{k+q\uparrow}^+ a_{k\downarrow} S_q^- + a_{k+q\downarrow}^+ a_{k\uparrow} S_q^+ + (a_{k+q\uparrow}^+ a_{k\uparrow} - a_{k+q\downarrow}^+ a_{k\downarrow}) S_q^z]. \tag{59}$$

Обобщенная поперечная спиновая восприимчивость системы с гамильтонианом (59)

$$\chi^{+-}(q, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \ll \sigma_q^+(t),\ \sigma_{-q}^- \gg \exp(i\omega t)\, dt \tag{60}$$

вычисляется в приближении хаотических фаз, как и для обычной модели Хаббарда (11). Полученный результат имеет вид [157]

$$\chi^{+-}(q,\ \omega)=\chi_0(q,\ \omega)/\{1-[U-2J^2\langle S^z\rangle/(\omega-Jnx)]\,\chi_0(q,\ \omega)\},\quad (61)$$

где

$$\chi_0(q,\ \omega)=-N^{-1}\sum_k \frac{n_{k+q\uparrow}-n_{k\downarrow}}{\omega-(\varepsilon_k-\varepsilon_{k+q})-\Delta}\quad (62)$$

— восприимчивость коллективизированных электронов в приближении Хартри — Фока; $\Delta = Unx + 2J\ \langle S^z\rangle$; $nx = N^{-1}\times\times\sum_k(n_{k\uparrow}-n_{k\downarrow})$. Аналогично находится поперечная восприимчивость для локализованных спинов:

$$\langle\langle S^+(q)|S^-(-q)\rangle\rangle_\omega=2\langle S^z\rangle/\{\omega-Jnx+ +2J^2\langle S^z\rangle\chi_0(q,\ \omega)\,[1-U\chi_0(q,\ \omega)]^{-1}\}.\quad (63)$$

Для $q,\ \omega\to 0$ найдем спектр спин-волновых возбуждений системы, который определяется полюсами восприимчивости (61) и (63):

$$\left.\begin{aligned}&\hbar\omega_{ac}=Dq^2 &&\text{— акустическая ветвь;}\\&\hbar\omega_{0p}=E_{0p}+D\,(UE_{0p}/J\Delta-1)\,q^2 &&\text{— оптическая ветвь.}\end{aligned}\right\}\quad (64)$$

Здесь $E_{0p} = Jnx + 2J\ \langle S^z\rangle$. Физически этот результат соответствует тому, что в системе имеются неэквивалентные спиновые подсистемы коллективизированных и локализованных спинов. Помимо этих двух типов возбуждений имеется еще континуум стонеровских возбуждений

$$\hbar\omega_{\mathbf{q}}=(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k+q}})+\Delta,\quad (65)$$

который определяется полюсами восприимчивости (62). Схема спектра магнитных возбуждений модели Зенера дана на рис. 10. Таким образом, в отличие от однозонной модели Хаббарда (11) спектр модели Зенера содержит дополнительную ветвь оптических спиновых волн. Наличие этой оптической спиновой волны связано с тем, что наша система состоит из двух подсистем, как и для двухзонной модели Хаббарда [137, 158]. Для того чтобы более ясно увидеть это, положим в гамильтониане (59) $U = 0$. Тогда придем к гамильтониану $(s - d)$-модели:

$$H=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k a^+_{k\sigma}a_{k\sigma}-JN^{-1}\sum_{kqi}\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i)\times \times[a^+_{k+q\uparrow}a_{k\downarrow}S^-_i+a^+_{k+q\downarrow}a_{k\uparrow}S^+_i+(a^+_{k+q\uparrow}a_{k\uparrow}-a^+_{k+q\downarrow}a_{k\downarrow})\,S^z_i].\quad (66)$$

Гамильтониан (66) широко используется для описания $(s - d)$ обменного взаимодействия между спином примеси и спинами электронов проводимости в немагнитных металлах (см. [159] и цитированную там литературу).

Рассмотрим вычисление функций Грина $\langle\langle S^-(\mathbf{q}) \mid S^+(-\mathbf{q})\rangle\rangle_\omega$. Для мнимой части восприимчивости в приближении хаотических фаз получим [25]

$$-\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\chi^{-+}(\mathbf{q},\ \omega) = 2S\delta(\omega - \omega_{ac}(\mathbf{q})) + nx\delta(\omega - \omega_{0p}(\mathbf{q})) +$$
$$+ (2S + nx)\frac{v_0}{(2\pi)^3}\int\limits_{<\varepsilon_f} d^3q\,[\delta(\omega - \varepsilon_{k+q\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow}) - \delta(\omega - \varepsilon_{k\downarrow} + \varepsilon_{k-q\uparrow})]. \tag{67}$$

В приближении эффективной массы $\varepsilon_k = k^2/2m^*$ при $q \to 0$ найдем, что

$$\left.\begin{aligned} &\omega_{ac}(q) = D_1 q^2; \quad D_1 = \frac{n\,[1 - (2/3)\,\varepsilon_f\,(x/JS)]}{2m^*(2S + nx)}\,; \\ &\omega_{0p}(q) = J\,(2S + nx) + D_2 q^2; \quad D_2 = \frac{S\,[1 + (4/3)\,\varepsilon_f/(Jn)]}{m^* x\,(2S + nx)}\,. \end{aligned}\right\} \tag{68}$$

Таким образом, модель Хаббарда допускает большое многообразие обобщений, что позволяет учитывать целый ряд физически важных взаимодействий в реальном переходном металле. Это особенно существенно при сравнении экспериментальных данных по неупругому рассеянию нейтронов в металле с результатами теоретических расчетов. Как следует из нашего обсуждения, детальное исследование спектра магнитных возбуждений в оптическом и акустическом диапазонах представляет очень большой интерес с точки зрения сравнения локализованной и зонной моделей магнетизма. Важно еще раз подчеркнуть, что эти два подхода, локализованный и зонный, не противоречат друг другу. Они, скорее, являются «дополнительными» аспектами квантовостатического описания состояния магнитоактивных электронов в реальном металле. Акустическая часть спектра магнитных возбуждений является отражением определенной локализованности спинов, а оптическая — их делокализации. Эту глубинную «дополнительность» хорошо отражает модель Зенера (58), являющаяся одной из наиболее интересных моделей магнетизма. Разнообразие моделей отражает разнообразие интересующих нас аспектов магнитного поведения реальных магнетиков.

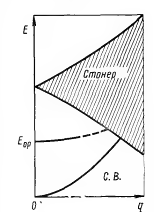


Рис. 10. Схематический вид спектра возбуждений модифицированной модели Зенера [157]

8. СПЛАВЫ МАГНИТНЫХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

В последние годы интенсивно изучали электронную структуру и разнообразные физические свойства сплавов переходных металлов. Для изучения магнитных свойств сплавов переходных металлов очень полезным оказался метод рассеяния медленных нейтронов. Исследование упругого и неупругого рассеяния медленных нейтронов в сплавах позволяет получить уникальную информацию о магнитных моментах и форм-факторах, а также об изменении спин-волновой жесткости.

Необходимо отметить, что нейтронные исследования распределения магнитного момента в магнитных сплавах и изменения спин-волновой жесткости во многом стимулировали развитие современных методов расчета электронной структуры неупорядоченных сплавов, которые чрезвычайно полезны для решения многих задач физики твердого тела. К ним относится широко теперь известный метод когерентного потенциала [160].

Модель Хаббарда оказалась очень полезной для описания многих электронных и магнитных свойств сплавов переходных металлов и успешно применяется в большом числе работ. При описании неупорядоченных сплавов с помощью модели Хаббарда вводятся случайные параметры, поэтому говорят о модели Хаббарда со случайными параметрами.

Перейдем к ее описанию. Предполагается, что взаимодействие электронов в бинарном неупорядоченном сплаве из двух магнитных компонент A_cB_{1-c} описывается следующим модельным гамильтонианом:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma} + \sum_i U_i n_{i\sigma} n_{i-\sigma}. \qquad (69)$$

Здесь, как и в (11), $a_{i\sigma}$, $a^{+}_{i\sigma}$ — операторы уничтожения и рождения электронов Ванье в узле i со спином σ. Считается, что интегралы перескока t_{ij} одинаковы для обоих сортов атомов A и B, т. е. $t^{AA}_{ij} = t^{BB}_{ij} = t_{ij}$; зонная структура чистых компонент A и B в отсутствие кулоновского взаимодействия одинаковая. Величины ε_i и U_i — одночастичный потенциал и внутриатомное кулоновское взаимодействие соответственно:

$$\varepsilon_i = \begin{cases} \varepsilon^A_i, & i \in A; \\ \varepsilon^B_i, & i \in B; \end{cases} \qquad U_i = \begin{cases} U^A_i, & i \in A; \\ U^B_i, & i \in B. \end{cases} \qquad (70)$$

Для неупорядоченного сплава величины ε_i и U_i принимают случайные значения в зависимости от того, заполнен ли узел атомом A или B.

Гамильтониан (69) исследовали многие авторы в различных предельных случаях. Если предположим, что какая-либо из ком-

понент сплава (например, B) состоит из немагнитных атомов, то можно положить параметр $U^B = 0$. Этот случай соответствует модели Вольффа [161, 162]. Если положим $\varepsilon_i^A = \varepsilon_i^B$ в (69), получим модельный гамильтониан, который рядом авторов [163, 164] был использован для теоретического описания сплава Pd — Ni. Случай, когда $U_i^A = U_i^B$, рассмотрен Лютером и Фульде [165] для анализа рассеяния парамагнонов на примесях; Ямада и Шимицу [166] рассчитали спин-волновой спектр. Мория [167] детально исследовал электронную структуру вблизи магнитной примеси ($U_i^A \neq 0$) в немагнитной матрице ($U_i^B = 0$) и рассчитал целый ряд физических характеристик примесной системы. Взаимодействие между примесями было рассмотрено в [168]. Все упомянутые работы [161—168] ограничены приближением сильно разбавленного сплава.

Метод когерентного потенциала [160] позволяет рассматривать сплав с конечной концентрацией примесей. Можно выделить два направления работ, использующих метод когерентного потенциала для описания неупорядоченных сплавов.

Начало первому направлению положила работа [169]. В ней была дана теоретическая интерпретация зависимости от концентрации средней намагниченности, атомных моментов компонент и электронной теплоемкости для сплава Ni_cFe_{1-c}. К этому направлению примыкают работы [170—174].

Подход Хасегава и Канамори (ХК) основан на использовании приближения Хартри — Фока для описания внутриатомной кулоновской корреляции. В этом случае гамильтониан (69) записывался в следующем виде [169]:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} E_{i\sigma} a_{i\sigma}^{+} a_{i\sigma}, \tag{71}$$

где

$$E_{i\sigma} = \varepsilon_i + U_i \langle n_{i-\sigma} \rangle. \tag{71a}$$

Таким образом, неупорядоченность, описываемая в рамках приближения когерентного потенциала, характеризуется двумя параметрами $E_{A\sigma}$ и $E_{B\sigma}$. Средние числа заполнения $\langle n_{i-\sigma} \rangle$ в (71а), которые различаются для разных компонент сплава ($\langle n_{i-\sigma} \rangle = n_{A\sigma}$ или $n_{B\sigma}$, $i \in A$, или B), должно определяться самосогласованным образом. Последнее обстоятельство приводит к тому, что не каждая элементарная ячейка является электронейтральной и может иметь место перенос конечного заряда.

Для одночастичного гамильтониана (71) применима стандартная схема метода когерентного потенциала, которую здесь опишем, следуя обозначениям работы [160]. В методе когерентного потенциала (СРА) рассматривается одноэлектронный гамильто-

ниан следующего вида:

$$H = W + D = W + \sum_n D_n. \qquad (72)$$

Здесь W — периодическая часть; D — сумма случайных вкладов, каждый из которых связан с одним узлом. Одноэлектронные свойства сплава вычисляются как средние по ансамблю по всем возможным конфигурациям атомов в решетке. Обычно рассматривают усредненную подобным образом одноэлектронную функцию Грина $G(z)$:

$$\langle G(z)\rangle = \langle (z - D - W)^{-1}\rangle \equiv (z - W - \Sigma)^{-1}. \qquad (73)$$

Определим T-матрицу для данной конфигурации сплава с помощью уравнения

$$G = \langle G\rangle + \langle G\rangle T \langle G\rangle. \qquad (74)$$

Тогда функциональное уравнение для определения неизвестного оператора Σ будет задаваться условием

$$\langle T[\Sigma]\rangle = 0. \qquad (75)$$

Уравнение (75) является самосогласованным определением оператора $\sum$.

Полагая, что

$$D - \Sigma = \sum_n (D_n - \Sigma_n) = \sum_n V_n, \qquad (76)$$

можно ввести локальный оператор рассеяния

$$T_n = V_n (1 - \langle G\rangle V_n)^{-1}. \qquad (77)$$

С помощью оператора T_n эффективная среда, характеризуемая оператором Σ, заменяется рассеянием на реальном атоме в данном узле n. В методе когерентного потенциала общее условие самосогласования (75) заменяется его одноузельным приближением

$$\langle T_n[\Sigma]\rangle = 0. \qquad (78)$$

Таким образом, при этом подходе примесь считается находящейся в эффективной среде, функция Грина которой подбирается так, чтобы T-матрица рассеяния на примеси в среднем была равна нулю. При этом будем пренебрегать рассеянием парами атомов и более крупными кластерами. Метод когерентного потенциала точен в атомном пределе, когда перескоки электронов с узла на узел очень маловероятны. Сравнение приближений виртуального кристалла, средней T-матрицы и когерентного потенциала, проведенное в [175], показало, что метод когерентного потенциала не хуже аппроксимации виртуального кристалла.

В методе когерентного потенциала усредненная функция Грина неупорядоченной системы $\langle G(E)\rangle$ получается из функции Грина для идеальной решетки заменой энергии на комплексную величину. Аналитические свойства величин, вычисляемых в одноузельном приближении когерентного потенциала, нетривиальны; функция Грина $\langle G(z)\rangle$ аналитична всюду, кроме линий разрезов, соответствующих примесной зоне и зоне основного кристалла.

Существенно, что в методе когерентного потенциала эффект рассеяния электронов вследствие неупорядоченности описывается комплексной величиной, а именно когерентным потенциалом. С точки зрения квантовой механики в этом нет ничего необычного. Напомним, что при многократном рассеянии волны на произвольном ансамбле рассеивателей вводится усредненная по ансамблю волновая функция, а потенциал в уравнении Шредингера становится комплексным [176]. Мнимая часть потенциала описывает поглощение вследствие рассеяния.

Основная характеристика спектра возбуждений системы есть плотность состояний на единицу энергии $D(\varepsilon)$. Она определяется мнимой частью функции Грина $\langle G(z)\rangle = G^{CPA}$. На основе одночастичной плотности состояний с помощью метода когерентного потенциала можно хорошо описать поведение параметра асферичности γ для сплавов Ni, Fe и Co [177].

Параметр асферичности является важной характеристикой, экспериментально измеряемой с помощью рассеяния медленных нейтронов и определяется следующим соотношением:

$$\gamma = \mu_{e_g}/\mu, \tag{79}$$

где μ_{e_g} — магнитный момент, определяемый электронами в состояниях e_g-типа; μ — полный спиновый магнитный момент.

Эксперименты по рассеянию нейтронов показывают, что измеряемые значения γ в зависимости от μ очень точно укладываются на прямую линию практически для всех сплавов Ni, Fe, Co, т. е

$$\gamma = a + b\mu. \tag{80}$$

Только для чистого Ni это не выполняется; γ_{Ni} значительно меньше величины, следующей из (80). Возможной причиной такого отклонения для чистого Ni может быть либо влияние корреляции электронов, либо специфика одночастичного поведения системы. В [177] были рассмотрены только одночастичные свойства системы в подходе Хасегава и Канамори (71) и показано, что для расчета параметра асферичности влияние корреляции не очень существенно. Как и в [169], рассматривалась область концентраций сплава $Ni_{1-c}Fe_c$ при $0 \leqslant c \leqslant 0{,}5$. Хасегава и Канамори с помощью метода когерентного потенциала вычислили магнитный момент μ и локальные моменты μ (Ni) и μ (Fe). Их

9–01068

результаты хорошо согласуются с экспериментом. Однако надо заметить, что они использовали не реальную плотность состояний, а сильно идеализированную функцию и проблема решалась с использованием многих свободных параметров.

В [177] впервые была использована реальная теоретическая плотность состояний [51, 178] для расчета параметра асферичности γ. Для точного расчета γ необходимо было отдельно учесть e_g- и t_{2g}-состояния. Получить такие раздельные плотности состояний весьма сложно из-за сильной гибридизации этих состояний. В [177] использовано то обстоятельство, что в точках и на линиях высокой симметрии, где гибридизация отсутствует, волновые функции можно отождествить с e_g- и t_{2g}-состояниями. Предполагалось, что количественно поведение волновых функций не сильно изменяется при переходе к другим точкам. Используемая теоретическая плотность состояний состоит из шести подзон, две из них связаны с s-электронами, а остальные четыре имеют в указанных точках и на линиях высокой симметрии поведение плотности состояний электронов в t_{2g}- и e_g-состояниях. Поэтому можно предположить приближенное разделение плотности состояний на составляющие для t_{2g}- и e_g-электронов.

В методе когерентного потенциала выражение для плотности состояний в сплаве $Ni_{1-c}Fe_c$ имеет вид [177]

$$D_i^{CPA}(\varepsilon) = -\frac{z_i}{\pi}\,\mathrm{Im}\,G_i^{CPA}(\varepsilon), \tag{81}$$

где

$$G_i^{CPA} = \frac{1}{z_i}\int d\varepsilon'\,\frac{D_i^{\mathrm{Ni}}(\varepsilon')}{\varepsilon - \Sigma_i - \varepsilon'}\,; \tag{82}$$

Σ_i — когерентный потенциал, определяемый из уравнения

$$\Sigma_i = x\Delta + \Sigma_i(\Delta - \Sigma_i)\,G_i^{CPA}(\varepsilon); \tag{83}$$

Δ описывает сдвиг между атомными уровнями Fe и Ni. В [169] этот параметр очень сильно зависит от спина ($\Delta_\uparrow/\Delta_\downarrow = 5{,}6$) и от концентрации. В [177], напротив, предполагалось, что Δ практически не зависит от этих величин, чтобы последовательно провести учет одночастичных свойств модели. Решение задачи удается провести без использования свободных параметров. Были вычислены плотность состояний $D_i^{CPA}(\varepsilon)$ и локальные плотности $D_i^{\mathrm{loc.Ni}}(\varepsilon)$ и $D_i^{\mathrm{loc.Fe}}(\varepsilon)$ для $i = t_{2g}$ и различных концентраций. Полученный на основе этих результатов для $D_i^{CPA}(\varepsilon)$ параметр асферичности γ показан на рис. 11. Согласие с экспериментом хорошее.

Интересно отметить, что результаты для вычисленных Эльком значений μ, μ (Ni) и μ (Fe) оказываются хуже, чем в работе Хасе-

гава и Канамори. Возможной причиной этого может быть влияние корреляций на значение μ, для описания которой в [169] использовали дополнительные свободные параметры. В то же время, как видно из рис. 11, поведение параметра асферичности хорошо объясняется уже на основе одночастичной плотности состояний, оптимально приближенной к реальной. Дальнейшее обсуждение подхода Хасегава—Канамори дано в [179].

Другое направление описания неупорядоченных сплавов с помощью гамильтониана (69) развивалось в [180, 181]; конкретно в [180] рассматривался сплав Pd — Ni. Подробно проанализировал различие этих двух подходов Фукуяма [162, 174]. Он показал,

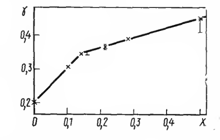


Рис. 11. Зависимость параметра асферичности γ от концентрации x (X — теоретические значения; I — эксперимент) [177]

что в подходе Харриса — Цукермана [180] основное внимание сосредоточивается на динамических эффектах кулоновского взаимодействия, а пространственным изменением потенциала пренебрегается. Поэтому такие одночастичные величины, как локальная плотность состояний, являются пространственно однородными, за исключением возможного существования виртуально связанных состояний. Схема является самосогласованной, если имеет место равенство $\varepsilon_{A\sigma} = \varepsilon_{B\sigma}$ в уравнении (69); в этом случае возможно в отличие от (71) учесть некоторые процессы электрон-дырочного рассеяния более высокого порядка.

Различие между подходами Хасегава — Канамори [169, 173, 179] и Харриса — Цукермана [180] наиболее заметно проявляется при рассмотрении коллективных эффектов, в частности, при вычислении спиновой восприимчивости. Это связано с тем, что при построении теории электронных и магнитных свойств неупорядоченных сплавов, описывающихся гамильтонианом (69), необходимо учитывать случайное расположение атомов компонент на решетке и влияние кулоновской корреляции электронов на электронную структуру и физические свойства. Если, как мы видели выше, одночастичные характеристики сплава (например, параметр асферичности γ) слабо зависят от корреляционных эффектов, то для коллективных свойств правильный учет корреляции более существен.

9. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ И ИХ УСТОЙЧИВОСТЬ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ

В последние годы большой интерес вызывает изучение неупругого рассеяния медленных нейтронов в неупорядоченных магнитных металлических сплавах [182—192]. Существует большое число экспериментальных данных об изменении спин-волновой жесткости D сплава в зависимости от концентрации.

Ранние расчеты энергии спиновых волн в сплавах в рамках зонной модели основывались на приближении жесткой зоны [52, 193—195]. В этом подходе сплав описывается как чистый металл с соответствующим образом подобранной плотностью электронов и зонным расщеплением. По существу, к этому направлению примыкает теория Ямада и Шимицу [166]. В 1973 г. Хилл и Эдвардс [196] получили приближенное выражение для спин-волновой жесткости D сплава, записанное через одноэлектронные функции Грина.

Для модели Хаббарда со случайными параметрами (69) расчет коэффициента спин-волновой жесткости был выполнен Фукуямой [172, 174], Ридингер и Научель-Блох [197, 198]. При этом электрон-электронное взаимодействие учитывалось в приближении Хартри — Фока (HF), а разупорядочение — в приближении когерентного потенциала (CPA). Эдвардс и Хилл [199] дали гораздо более простой и изящный вывод выражения для спин-волновой жесткости в рамках приближения CPA — RPA, используя общие выражения (17), (18). Схема расцепления в RPA дана в [200].

В [184—192] приведены результаты нейтронных измерений спин-волновой жесткости сильно ферромагнитных сплавов на основе Ni и дана подробная интерпретация результатов с помощью зонной модели. В частности, в [191] с помощью неупругого рассеяния нейтронов измерялся коэффициент спиновой жесткости сплава $Ni_{1-c}Co_c$ для концентраций $c = 0{,}21$ и $0{,}5$ (при комнатной температуре) и для концентрации $c = 0{,}05$ (при $T = 4{,}2$ и 293 K). Измерения были проведены с помощью трехосного спектрометра. Найдено, что коэффициент жесткости медленно уменьшается при увеличении концентрации Co, причем для $c = 0{,}05$ величина D довольно слабо зависит от температуры. Между значениями $c = 0{,}21$ и $c = 0{,}5$ величина D почти не меняется. Теоретическая интерпретация этим результатам сначала дается на основе простейшей модели жесткой зоны, а корреляция описывается в приближении Хартри — Фока. В этом приближении рассчитаны D для трех сплавов NiCo, NiFe и NiMn. Наилучшее согласие с экспериментом наблюдается для первого сплава, наихудшее — для последнего. Это, вероятно, связано с увеличением различия валентности компонент сплава. Далее используют

приближение RPA — CPA. Согласие с экспериментом по сравнению с моделью жесткой зоны улучшается: для сплава NiCo незначительно и более значительно для NiFe и NiMn. Тем не менее, как отмечают авторы, приближение RPA — CPA неудовлетворительно объясняет особенности поведения коэффициента жесткости в сплаве $Ni_{1-c}Fe_c$ для $c = 0{,}5$.

Таким образом, дальнейшее улучшение теории должно основываться на более точном учете межэлектронной корреляции. Дело в том, что приближение Хартри — Фока сильно преувеличивает корреляционные эффекты и тенденцию системы к образованию магнитоупорядоченного состояния. Более точный учет корреляции должен ослаблять тенденцию системы к образованию магнитного порядка и тем самым уменьшать спин-волновую жесткость. Эта идея была реализована Э. Коллей, В. Коллей, А. Л. Куземенским [201].

Для учета эффектов корреляции электронов при вычислении D в [202] приведена схема, выходящая за рамки RPA и основанная на когерентном лестничном приближении CLA [203, 204], т. е. на самосогласованной комбинации CPA и локального лестничного приближения [205] в канале частица—частица. Такое T-матричное приближение удобно использовать для сильных короткодействующих взаимодействий и малой плотности носителей, так что его можно применить к Ni, Pd и Pt. Если зависящую от энергии T-матрицу заменить эффективным взаимодействием типа Канамори [206], как это делалось, например, при вычислении парамагнитной восприимчивости [207] и магнитострикции [208], то снова приходим к теории спиновых волн в рамках RPA — CPA.

Теория межэлектронной корреляции в локальном лестничном приближении в неупорядоченных сплавах, развитая в работах [202—204], оказалась очень полезной для исследования спиновых волн и их устойчивости как в чистых металлах [209], так и в неупорядоченных ферромагнитных металлических сплавах [201, 210]. В рамках этого подхода вычислим здесь, следуя работе [201], величину D для однозонной модели Хаббарда со случайными параметрами при нулевой температуре. Корреляционные эффекты определяли с сохранением энергетической зависимости T-матрицы.

Перепишем гамильтониан Хаббарда со случайными параметрами (69) в следующем виде:

$$H^{\{\nu\}} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k n_{k\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_i^{\nu} n_{i\sigma} + \sum_i U_i^{\nu} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \qquad (84)$$

где $n_{k\sigma}$ $(n_{i\sigma})$ — оператор чисел заполнения для состояний Блоха (Ванье) со спином σ; ε_k — зонная энергия, которая предполагается независимой от заданной конфигурации $\{\nu\}$ сплава. Одно-

частичный потенциал ε_i^ν и затравочное внутриатомное кулоновское взаимодействие U_i^ν принимают случайные значения ε^ν и U^ν ($\nu = A, B$) в зависимости от того, заполнен ли узел атомом A или B. Индекс $\{\nu\} = \{\nu_1, \ldots, \nu_i, \ldots, \nu_N\}$, где $\nu_i = A, B$ описывает конфигурацию сплава в целом.

Энергию спиновых волн $\omega_q = Dq^2$ для кубических кристаллов можно определить по полюсу поперечной спиновой восприимчивости $\chi^{+-}(q, \omega)$, что приводит к следующему выражению для коэффициента жесткости:

$$D = -\frac{1}{2\langle\langle S_i^z\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c} \lim_{\omega\to 0} \lim_{q\to 0} \left[\frac{\omega^2}{q^2} \left(\chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{2\langle\langle S_i^z\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c}{\omega} \right) \right], \quad (85)$$

где $2\langle\langle S_i^z\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c = (n_\uparrow - n_\downarrow)$ — намагниченность на узел (n_σ — среднее число электронов на узел); $\langle\ldots\rangle^{\{\nu\}}$ — среднее по основному состоянию при заданной конфигурации $\{\nu\}$; $\langle\ldots\rangle_c$ — среднее по конфигурациям. В работах [196, 199, 200] для сплавов была использована формула

$$D = \frac{1}{2\langle\langle S_i^z\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c} \left[\lim_{q\to 0} \frac{1}{q^2} \langle\langle [S_{\mathbf{q}}^+, qJ_{-\mathbf{q}}^-]\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c - \lim_{\omega\to 0} \lim_{q\to 0} \chi_J^{+-}(\mathbf{q}, \omega) \right], \quad (86)$$

записанная в терминах функции отклика $\chi_J^{+-}(\mathbf{q}, \omega)$ для спинового тока по аналогии с (17).

Для модели Хаббарда со случайными параметрами (84), фурье-образы оператора плотности поперечного спина $S_{\mathbf{q}}^+$ (или $S_{-\mathbf{q}}^- = (S_{\mathbf{q}}^+)^+$) и оператора тока $J_{\mathbf{q}}^+$ (или $J_{-\mathbf{q}}^- = (J_{\mathbf{q}}^+)^+$), которые здесь не зависят от случайных параметров, имеют вид

$$\left. \begin{aligned} S_{\mathbf{q}}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}; \\ qJ_{\mathbf{q}}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\, a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, \end{aligned} \right\} \quad (87)$$

где $a_{\mathbf{k}\sigma}^+$ ($a_{\mathbf{k}\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона в состоянии $|\mathbf{k}\sigma\rangle$; N — число узлов решетки.

Восприимчивости, входящие в (85), (86), могут быть выражены [202] с помощью уравнения (87) через причинные функции Грина при нулевой температуре следующим образом:

$$\begin{aligned} \chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega) &= -\langle\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-\rangle\rangle_\omega^{\{\nu\}}\rangle_c = \\ &= \frac{i}{N} \int \frac{dE}{2\pi} \langle \mathrm{tr}\{\Lambda_{0\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega; \mathbf{q})\, G_\downarrow^{\{\nu\}} \times \\ &\quad \times (E+\omega)\, \lambda_0(-\mathbf{q})\, G_\uparrow^{\{\nu\}}(E)\}\rangle_c; \end{aligned} \quad (88)$$

$$q\chi_J^{+-}(\mathbf{q},\omega) = -\langle\langle\langle qJ_{\mathbf{q}}^{+},\ qJ_{-\mathbf{q}}^{-}\rangle\rangle_{\omega}^{\{\nu\}}\rangle_c = -\frac{i}{N}\int\frac{dE}{2\pi}\langle \mathrm{tr}\,\{\Lambda_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega;\mathbf{q})\,G_{\downarrow}^{\{\nu\}}\times (E+\omega)\,\lambda_1(-\mathbf{q})\,G_{\uparrow}^{\{\nu\}}(E)\}\rangle_c, \quad (89)$$

где

$$\Lambda_{\substack{\alpha ij\\ \uparrow\downarrow}}^{\{\nu\}}(E, E+\omega;\ \mathbf{q}) = \lambda_{\alpha ij}(\mathbf{q}) - \delta_{ij}\int\frac{d\overline{E}}{2\pi}\,\mathrm{i}I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E, \overline{E}+\omega;\ \omega)\sum_{mn}G_{im\uparrow}^{\{\nu\}}(\overline{E})\times \Lambda_{\substack{\alpha mn\\ \uparrow\downarrow}}^{\{\nu\}}(\overline{E}, \overline{E}+\omega;\ \mathbf{q})\,G_{ni\downarrow}^{\{\nu\}}(\overline{E}+\omega)\quad (\alpha = 0,\ 1); \quad (90)$$

$$\left.\begin{array}{c}\lambda_{0ij}(\mathbf{q}) = \exp(-\mathrm{i}\mathbf{q}\mathbf{R}_i)\,\delta_{ij};\ \ \lambda_{1ij}(\mathbf{q}) = \\ = t_{ij}[\exp(-\mathrm{i}\mathbf{q}\mathbf{R}_i) - \exp(-\mathrm{i}\mathbf{q}\mathbf{R}_j)];\\ t_{ij} = 1/N\sum_{k}\varepsilon_k\exp[\mathrm{i}\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)].\end{array}\right\} \quad (91)$$

Здесь предполагалась локальность только неприводимой вершины частица — дырка $I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E, \overline{E}+\omega;\ \omega) \equiv I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E, \overline{E}+\omega;\ E+\omega, \overline{E})$, а шпур означает суммирование (без спина) по одночастичным состояниям. Как видно, формула (86) более удобна для вычислений, чем (85), так как уравнение Бете — Солпитера (90) для $\alpha = 1$ можно решить без привлечения дальнейших предположений относительно $I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}$. Разложение λ_1 и эффективного тока $\Lambda_1^{\{\nu\}}$ с переворотом спина, входящих в (89) и (90), в первом порядке по $\mathbf{q}$ и учет кубической симметрии приводит к формулам:

$$\chi_J^{+-}(\mathbf{q}=0,\omega) = \frac{i}{3N}\int\frac{dE}{2\pi}\langle \mathrm{tr}\,\{\boldsymbol{\Lambda}_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega)\times G_{\downarrow}^{\{\nu\}}(E+\omega)\,\mathbf{j}G_{\uparrow}^{\{\nu\}}(E)\}\rangle_c; \quad (92)$$

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\substack{1ij\\ \uparrow\downarrow}}^{\{\nu\}}(E, E+\omega) = \mathbf{j}_{ij} - \delta_{ij}\int\frac{d\overline{E}}{2\pi}\,\mathrm{i}\,I_{i\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E, \overline{E}+\omega;\ \omega)\times \sum_{mn}G_{im\uparrow}^{\{\nu\}}(\overline{E})\boldsymbol{\Lambda}_{\substack{1mn\\ \uparrow\downarrow}}^{\{\nu\}}(\overline{E}, \overline{E}+\omega)\,G_{ni\downarrow}^{\{\nu\}}(\overline{E}+\omega), \quad (93)$$

где введены обозначения $\mathbf{j}_{ij} = -\mathrm{i}t_{ij}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$;

$$\lambda_1(q) = \mathbf{q}\cdot\mathbf{j};\ \ \Lambda_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega;\ q) = \mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\Lambda}_{1\uparrow\downarrow}^{\{\nu\}}(E, E+\omega).$$

Под знаком шпура $\mathbf{j}$ и $\boldsymbol{\Lambda}_1^{\{\nu\}}$ образуют скалярное произведение.

Отделяя диагональные и недиагональные части $\Lambda_1^{\{\nu\}}$ в (92) и (93), получаем:

$$\chi_J^{+-}(\mathbf{q}=0,\ \omega)=$$
$$=\frac{\mathrm{i}}{3N}\int\frac{dE}{2\pi}\langle\operatorname{tr}\{\mathbf{j}G_\downarrow^{\{\nu\}}(E+\omega)\,\mathbf{j}G_\uparrow^{\{\nu\}}(E)\}\rangle_c+\tilde{\chi}_J^{+-}(\mathbf{q}=0,\ \omega),\qquad(94)$$

где

$$\tilde{\chi}_J^{+-}(q=0,\ \omega)=\frac{\mathrm{i}}{3N}\int\frac{dE}{2\pi}\left\langle\sum_i\Lambda_{1ij}(E,\ E+\omega)\times\right.$$
$$\left.\times\,\mathbf{K}_{ii\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E+\omega,\ E)\right\rangle_c,\qquad(95)$$

$$\mathbf{K}_{ii\downarrow\uparrow}^{\{\nu\}}(E+\omega,\ E)=$$
$$=\sum_{mn}G_{im\downarrow}^{\{\nu\}}(E+\omega)\,\mathbf{j}_{mn}G_{ni\uparrow}^{\{\nu\}}(E).\qquad(96)$$

Поскольку конфигурационное усреднение в (95) выходит за рамки CPA, воспользуемся приближением [202] следующего типа: $\langle\Lambda_1^{\{\nu\}}\cdot\mathbf{K}^{\{\nu\}}\rangle_c=\langle\Lambda_1^{\{\nu\}}\rangle\langle\mathbf{K}^{\{\nu\}}\rangle$, так что

$$\mathbf{K}_{\downarrow\uparrow}(E+\omega,\ E)=\langle G_\downarrow^{\{\nu\}}(E+\omega)\,\mathbf{j}G_\uparrow^{\{\nu\}}(E)\rangle_{cii}=$$
$$=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\mathcal{G}_{\mathbf{k}\downarrow}(E+\omega)\,\mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow}(E)\,\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}}=0\qquad(97)$$

и

$$\tilde{\chi}_J^{+-}(\mathbf{q}=0,\ \omega)=0,$$

т. е. нет вершинных поправок, благодаря симметрии относительно обращения времени. Здесь $\mathcal{G}_{\mathbf{k}\sigma}$ — когерентная одночастичная функция Грина с учетом электрон-электронных корреляций (см. ниже). Таким образом, на основе CPA получается формула

$$\chi_J^{+-}(\mathbf{q}=0,\ \omega)=\frac{\mathrm{i}}{3N}\int\frac{dE}{2\pi}\sum_{\mathbf{k}}\mathcal{G}_{\mathbf{k}\downarrow}(E+\omega)\,\mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow}(E)\,(\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}})^2.\qquad(98)$$

Подставляя (98) и предельное выражение

$$\lim_{q\to0}\frac{1}{q^2}\langle\langle[S_{\mathbf{q}}^+,\ qJ_{-\mathbf{q}}^-]\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c=$$
$$=\frac{1}{6N}\sum_{\mathbf{k}\sigma}\langle\langle n_{\mathbf{k}\sigma}\rangle^{\{\nu\}}\rangle_c\,\nabla_{\mathbf{k}}^2\varepsilon_{\mathbf{k}}\qquad(99)$$

в (86) и переходя от причинной к запаздывающей r функции Грина, получаем

$$D=\frac{1}{6\pi(n_\uparrow-n_\downarrow)}\operatorname{Im}\int_{-\infty}^{\mu}dE\,\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}(\mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow}^r(E)-\mathcal{G}_{\mathbf{k}\downarrow}^r(E))^2(\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}}),\quad(100)$$

где μ — энергия Ферми. Это выражение формально совпадает с тем, которое следует из RPA — CPA [172, 196, 199] на основе приближения HF.

В настоящем расчете, однако, для функции $\mathcal{G}_{\mathbf{k}\sigma}$ используется схема CLA [204]. Тогда корреляционная часть в терминах частично усредненных причинных функций имеет вид

$$\Sigma^{\nu}_{Uii\sigma}(E) = \int \frac{d\bar{E}}{2\pi i}\, G^{\nu}_{ii-\sigma}(\bar{E})\, T^{\nu}_{i}(E+\bar{E}), \ (\nu = A, B); \tag{101}$$

$$T^{\nu}_{i}(E) = \left[\frac{1}{U^{\nu}_{i}} + \int \frac{d\bar{E}}{2\pi}\, G^{\nu}_{ii\sigma}(\bar{E})\, G^{\nu}_{ii-\sigma}(E-\bar{E})\right]^{-1}, \tag{102}$$

где T^{ν}_{i} — эффективная двухчастичная вершина. Локальная функция Грина $G^{\nu}_{ii\sigma}(z)$, записанная в виде резольвенты (здесь z — комплексная энергия), перенормируется следующим образом:

$$G^{\nu}_{ii\sigma}(z) = F_{\sigma}(z) / \{1 - [\tilde{\varepsilon}^{\nu}_{i\sigma}(z) - \Sigma_{\sigma}(z)]\, F_{\sigma}(z)\}; \tag{103}$$

$$\tilde{\varepsilon}^{\nu}_{i\sigma}(z) = \varepsilon^{\nu}_{i} + \Sigma^{\nu}_{Uii\sigma}(z); \tag{104}$$

$$F_{\sigma}(z) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}\sigma}(z); \tag{105}$$

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\sigma}(z) = (z - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\sigma}(z))^{-1}; \tag{106}$$

$$\Sigma_{\sigma}(z) = c\tilde{\varepsilon}^{A}_{\sigma}(z) + (1-c)\,\tilde{\varepsilon}^{B}_{\sigma}(z) - $$
$$- [\tilde{\varepsilon}^{A}_{\sigma}(z) - \Sigma_{\sigma}(z)]\, F_{\sigma}(z)\, [\varepsilon^{B}_{\sigma}(z) - \Sigma_{\sigma}(z)]; \tag{107}$$

$$n = \sum_{\sigma} n_{\sigma} = -\frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\mu} dE \,\mathrm{Im}\, F^{r}_{\sigma}(E). \tag{108}$$

Здесь Σ_{σ} — когерентный потенциал; n — среднее число электронов на узел. В отличие от обычного CPA атомный потенциал $\tilde{\varepsilon}^{\nu}_{i\sigma}(z)$ [в (107) индекс i опущен] приобретает энергетическую зависимость благодаря массовому оператору $\Sigma^{\nu}_{Uii}(z)$ за счет корреляций. В приближении HF решение систем уравнений (103)—(108) упрощается, так как вместо (101) и (102) используется собственная энергия $\Sigma^{\nu HF}_{Uii\sigma} = U^{\nu}_{i} n^{\nu}_{i-\sigma}$, где $n^{\nu}_{i\sigma}$ — среднее число электронов со спином σ на ν-узлах, определяемое формулой

$$n^{\nu}_{i\sigma} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\mu} dE \,\mathrm{Im}\, G^{r\nu}_{ii\sigma}(E). \tag{109}$$

С учетом конкретной вершины $I_{i\uparrow}{}^{\{\nu\}}_{\downarrow\downarrow\uparrow}(E, \bar{E} + \omega; \omega) = - T^{\{\nu\}}_{i}(E + \bar{E} + \omega)$ и заменой $\nu \to \{\nu\}$ находим из уравнений

(90), (101), (102) соотношение типа Уорда — Такахаши

$$\omega\Lambda^{\{\nu\}}_{0i\uparrow\downarrow}(E, E+\omega, \mathbf{q})\,\delta_{ij} - \Lambda^{\{\nu\}}_{1ij\uparrow\downarrow}(E, E+\omega, \mathbf{q}) =$$

$$= \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i)\, G^{\{\nu\}-1}_{ij\downarrow}(E+\omega) - G^{\{\nu\}-1}_{ij\uparrow}(E)\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j), \quad (110)$$

причем

$$(G^{\{\nu\}-1}(E))_{ij\sigma} = (E-\varepsilon^{\nu}_{i})\,\delta_{ij} - t_{ij} - \Sigma^{\{\nu\}}_{Uii\sigma}(E)\,\delta_{ij}. \quad (111)$$

Рассмотрим теперь вопрос об устойчивости основного состояния ферромагнетика относительно спин-волновых возбуждений. Для чистых металлов этот вопрос подробно обсужден в [211] в зонной модели в приближении HF и в [209] LLA. Условие устойчивости основного состояния ферромагнетика

$$\hat{D} = D\,(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) > 0 \quad (112)$$

можно получить из спектрального представления

$$\chi^{+-r}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \,\frac{\operatorname{sign}\omega'}{\omega-\omega'+i\varepsilon}\,\hat{I}_{S^{+}_{\mathbf{q}}S^{-}_{-\mathbf{q}}}(\omega'), \quad (113)$$

где спектральная интенсивность $\hat{I}_{S^{+}_{\mathbf{q}}S^{-}_{-\mathbf{q}}}(\omega) \geqslant 0$ относится к конфигурационно-усредненной системе. Магнонный полюс

$$\chi^{+-r}_{\text{pole}}(\mathbf{q}, \omega) = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})/(\omega - Dq^2 + i\varepsilon) \quad (114)$$

для малых q и ω можно выделить из континуума Стонера, поскольку спектральный вес возбуждений пар частица — дырка стремится к нулю при $q \to 0$. Сравнение (113) и (114) приводит к критерию (112). В данном приближении спин-волновое затухание [вместо $\varepsilon \to 0$ в (114)] принимает вид

$$\gamma_q = \frac{q^2}{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}\operatorname{Im}\chi^{+-r}_{J}(0, Dq^2) =$$

$$= \frac{Dq^4}{3\pi(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})N}\sum_{\mathbf{k}} \operatorname{Im}\mathcal{G}^{r}_{\mathbf{k}\uparrow}(\mu)\operatorname{Im}\mathcal{G}^{r}_{\mathbf{k}\downarrow}(\mu)\,(\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}})^2, \quad (115)$$

как и в RPA — CPA [174], однако здесь учитывается электрон — электрон-рассеяние.

Рассмотрим теперь численные результаты CLA по D и сравнение их с экспериментальными данными по рассеянию нейтронов для сплавов NiFe и NiPd. Для проведения части расчета D в аналитической форме воспользуемся упрощенными выражениями [212]:

$$\rho_0(E) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\delta(E-\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{2}{\pi w}\left[1-\left(\frac{E}{w}\right)^2\right]^{1/2}\theta(w-|E|); \quad (116)$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\delta(E-\varepsilon_{\mathbf{k}})(\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}})^2 = \frac{2v_m^2}{\pi w}\left[1-\left(\frac{E}{w}\right)^2\right]^{3/2}\theta(w-|E|), \quad (117)$$

где w — полуширина зоны; v_m — величина порядка wa; a — параметр решетки. Суммирование по $\mathbf{k}$ в (105) приводит с учетом невозмущенной плотности состояний (116) к функции Грина

$$F_\sigma(z)=(2/w)(\tilde{z}_\sigma - \mathrm{i}\sqrt{1-\tilde{z}_\sigma^2}); \quad \tilde{z}_\sigma = [z-\Sigma_\sigma(z)]/w. \qquad (118)$$

Чтобы (118) было однозначным, выбираем ту ветвь в плоскости $\tilde{z}_\sigma$ с разрезом вдоль действительной оси от -1 до $+1$, где квадратный корень положителен на верхнем берегу разреза.

Переписывая (100) в виде

$$D=\frac{1}{6\pi(n_\uparrow-n_\downarrow)}\,\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\mu} dE\,[\Pi_{\uparrow\uparrow}^{rr}(E,E)+\Pi_{\downarrow\downarrow}^{rr}(E,E)-2\Pi_{\uparrow\downarrow}^{rr}(E,E)], \qquad (119)$$

где введены обозначения $\Pi_{\sigma\sigma'}^{rr}(E,E)=\Pi_{\sigma\sigma'}(E^+,E^+)$, $E^+=E+\mathrm{i}0$ и

$$\Pi_{\sigma\sigma'}(z,z')=\frac{1}{N}\sum_k \mathcal{G}_{k\sigma}(z)\,\mathcal{G}_{k\sigma'}(z')\,(\nabla_k\varepsilon_k)^2, \qquad (120)$$

затем применяя теорему о вычетах при суммировании по $\mathbf{k}$ в (120) с учетом аппроксимации (117), найдем

$$\Pi_{\sigma\sigma}^{rr}=\frac{2v_m^2}{w^2}\left(3z_\sigma^2-\frac{3}{2}-3\mathrm{i}z_\sigma\sqrt{1-z_\sigma^2}\right); \quad z_\sigma=\frac{E^+-\Sigma_\sigma(E^+)}{w}; \qquad (121)$$

$$\Pi_{\uparrow\downarrow}^{rr}=\frac{2v_m^2}{w^2}\left(z_\uparrow^2+z_\downarrow^2+z_\uparrow z_\downarrow-\frac{3}{2}+\mathrm{i}\,\frac{(1-z_\uparrow^2)^{3/2}-(1-z_\downarrow^2)^{3/2}}{z_\uparrow-z_\downarrow}\right). \qquad (122)$$

Следовательно,

$$D=\frac{v_m^2}{3\pi w^2(n_\uparrow-n_\downarrow)}\,\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\mu} dE\left[(z_\uparrow-z_\downarrow)^2-\right.$$
$$-\mathrm{i}\sqrt{1-z_\uparrow^2}\left(3z_\uparrow+\frac{2(1-z_\uparrow^2)}{z_\uparrow-z_\downarrow}\right)-$$
$$\left.-\mathrm{i}\sqrt{1-z_\downarrow^2}\left(3z_\downarrow-\frac{2(1-z_\downarrow^2)}{z_\uparrow-z_\downarrow}\right)\right]. \qquad (123)$$

Скалярная статическая электропроводность σ вычисляется в том же приближении, что и D. В результате придем к модифицированной формуле Кубо — Гринвуда

$$\sigma=\frac{e^2N}{6\pi V}\sum_\sigma[\Pi_{\sigma\sigma}^{ra}(\mu)-\mathrm{Re}\,\Pi_{\sigma\sigma}^{rr}(\mu)]\equiv\sum_\sigma\sigma_\sigma, \qquad (124)$$

которая содержит функции Грина, перенормированные за счет электронных корреляций в рамках CLA. Здесь $\Pi_{\sigma\sigma}^{ra}(\mu)\equiv\equiv\Pi_{\sigma\sigma}(\mu^+,\mu^-)$, $\mu^-=\mu-\mathrm{i}0$; V — объем системы; e — единич-

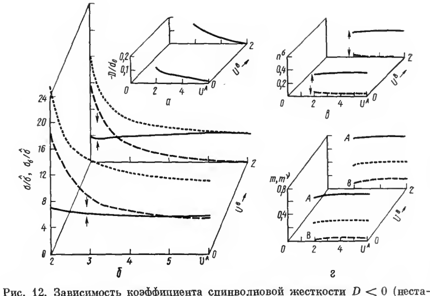


Рис. 12. Зависимость коэффициента спинволновой жесткости $D < 0$ (нестабильный случай) (*а*); статической электропроводности σ_σ, σ (*б*); плотности электронов n_σ (*в*); намагниченности m^ν, m (*г*) от U^ν ($\nu = A, B$); приближение Хартри — Фока; параметры (w, ε^A, ε^B, c, n) = (1, —0,8; 0; 0,4; 0,4).

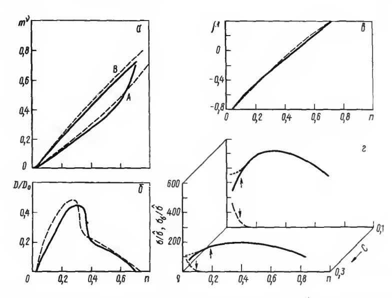


Рис. 13. Зависимость парциальной намагниченности m^ν (*а*); коэффициента жесткости D (*б*), энергии Ферми μ (*в*), электропроводности σ_σ, σ (*г*) от n; приближение Хартри — Фока; параметры (w, ε^A, ε^B, U^A, U^B) = (1; 0,2; 0; 4; 3) (*а*, *б*, *в*):

сплошные линии соответствуют составу $c = 0,1$; штриховые — $c = 0,3$

ный заряд. Вводя (121) и (122) с заменой $\Pi^{ra}_{\sigma\sigma} = \Pi^{rr}_{\uparrow\downarrow}$ $[z_\uparrow \to \hat{z}_\sigma,\ z_\downarrow \to \hat{z}^*_\sigma]$ в (124), получаем зависящую от спина электропроводность (при $\operatorname{Im}\Sigma_\sigma(\mu^+) < 0$):

$$\sigma_\sigma = \hat{\sigma}\pi \left[\frac{2(\operatorname{Im}\Sigma_\sigma(\mu^+))^2}{w^2} + \frac{w}{\operatorname{Im}\Sigma_\sigma(\mu^+)} \operatorname{Re} \times \right.$$
$$\left. \times \left\{ \mathrm{i}\sqrt{1-\hat{z}^2_\sigma} \left(\mathrm{i}(1-\hat{z}^2_\sigma) + \frac{3}{w}\hat{z}_\sigma \operatorname{Im}\Sigma_\sigma(\mu^+) \right) \right\} \right], \qquad (125)$$

где

$$\hat{z}_\sigma = [\mu^+ - \Sigma_\sigma(\mu^+)]/w; \quad \hat{\sigma} = e^2 v_m^2 N/(3\pi^2 V). \qquad (126)$$

Численный анализ проводится следующим образом: сначала выбираются параметры w, ε^A, $\varepsilon^B = 0$, U^A, U^B, c, n, затем решается самосогласованная система уравнений (101)—(108) с функцией

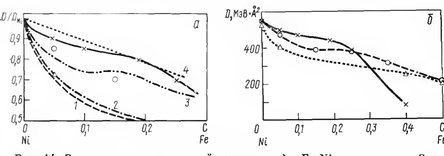


Рис. 14. Зависимость спинволновой жесткости D в Fe_cNi_{1-c} от состава. Значения $D(x)$, рассчитанные в когерентном лестничном приближении при $(w, \varepsilon^A, \varepsilon^B, U^A, U^B, n) = (0{,}5;\ -0{,}24;\ 0;\ 2{,}66;\ 3{,}4;\ 0{,}6)$ [(б) абс. ед.—$2w = 4{,}15$ эВ, $\alpha = 4$ Å]:

а — расчет: *1* — [196], 2 — [198], *3* — [199], *4* — [200] *б* — эксперимент: □ — [99], △ — [184], ○ — [185]

Грина (118). Полученные результаты используются для нахождения D по (123).

Переходная область между слабым и сильным ферромагнетизмом в зависимости от внутриатомного отталкивания U^ν, рассматриваемого здесь в приближении HF, показана на рис. 12. В частности, в [213] были исследованы решения с параметрами $U^A = 2$, $U^B = 0$ и $U^A = 2$, $U^B = 2$, но спиновые волны не рассматривались. Расчеты коэффициента жесткости D (в единицах $d_0 = (1/9)\,wa^2$) в RPA — CPA (см. рис. 12, *а*) указывают на нестабильность ферромагнитного состояния относительно возбуждения спиновых волн. Парциальные и полная средние намагниченности $m^\nu = n^\nu_\uparrow - n^\nu_\downarrow$ и $m = n_\uparrow - n_\downarrow$ изображены на рис. 12, *г*. Ограниченная область стабильного (в основном, насыщенного) ферромагнетизма $D > 0$ дана на рис. 13, *б*, $m^\nu > 0$ (см. рис. 13, *а*), рас-

считанная в хартри-фоковском приближении в зависимости от плотности электронов n. Нуль D при наименьшем значении n соответствует приблизительно критерию типа Стонера [204], тогда как другой нуль говорит об изменении типа магнитного порядка.

Как видно из рис. 14, большое количество нейтронных данных для D имеется для сплавов NiFe. В качестве проверки были учтены

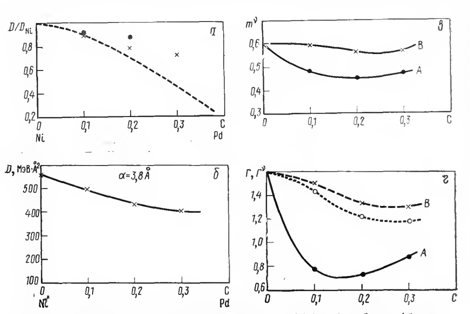


Рис. 15. Зависимость спин-волновой жесткости D (x) (a); D в абс. ед. (*б*), парциальной намагниченности m^ν (*в*); эффективные кулоновские взаимодействия Γ^ν, Γ (*г*) от c в Pd_c Ni_{1-c}, рассчитанные в когерентном лестничном приближении

$(2w)^{Pd}$, $(2w)^{Ni}$, $\varepsilon^{Pd} - \varepsilon^{PNi}$, U^d, $U^{Ni} = (6{,}05;\ 4{,}15;\ 0{,}3;\ 9{,}17;\ 14{,}11)$ эВ, $n^{Pd} = 0{,}4$; $n^{Ni} = 0{,}6$; *а* — — — — расчет [214]; ● — эксперимент (ср. [214])

межэлектронные корреляции, хотя данная схема более удобна для описания компоненты Ni с 0,6 дырками на атом в d-зоне, чем компоненты Fe с высокой дырочной плотностью (см., например, на малое значение D при $c = 0{,}4$ на рис. 14, *б*). Сравнение расчетов D (c) на основе CLA с результатами, полученными в рамках RPA — CPA [196, 198], теории «жесткой зоны» [199], подхода [200], а также с данными по неупругому рассеянию нейтронов [199, 184, 185] дано на рис. 14. Коэффициент жесткости D для чистого Ni оказывается близким к $D_{Ni}=555$ МэВ·Å², измеренной при 4,2 К [99].

Расчеты для сплавов NiPd были проведены в CLA и эти результаты (рис. 15) сравниваются с данными работы [214]. Параметры для чистых систем выбирались на основе [208]. Сплав формируется с $n = cn^{\mathrm{Pd}} + (1 - c)\, n^{\mathrm{Ni}}$, а различные интегралы перескока учитываются через ширину зоны $2w = c\,(2w)^{\mathrm{Pd}} + (1 - c)\,(2w)^{\mathrm{Ni}}$. Заметим, что в приведенных единицах U^{Pd}, U^{Ni}, $\varepsilon^{\mathrm{Pd}} - \varepsilon^{\mathrm{Ni}}$ для всех c приводятся к шкале $2w = 1$. Затравочные U^{ν} перенормируются самосогласованным образом, в результате имеем двухчастичные вершины $T_i^{\nu}(E + \bar{E})$. В частности, $\Gamma^{\nu} = T_i^{\nu}(2\mu)$ и $\Gamma = c\Gamma^A + (1 - c)\,\Gamma^B$ в приведенных единицах изображены на рис. 15, *г*.

Таким образом, численные результаты, полученные в рамках CLA, указывают на влияние электрон-электронных корреляций на энергию магнонов в длинноволновом пределе $\omega_q = Dq^2$. Несмотря на однозонное приближение в модели Хаббарда с упрощенной структурой зоны и диагональным беспорядком, для сплавов на основе Ni получены физически разумные значения D. Для зависящих от энергии двухчастичных вершин предполагается локальность, что позволяет сохранить одноузельный характер CPA. Спин-волновое затухание оказывается малым, порядка q^4. В этом смысле предложенный в [201, 202, 209] самосогласованный метод для нахождения стабильного ферромагнетизма в сплавах переходных металлов представляется интересным и перспективным. Данный метод может также оказаться полезным при исследовании изменения спин-волновой жесткости сплавов ферромагнитных переходных металлов в зависимости от степени упорядочения сплава.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование упругого и неупругого рассеяния нейтронов в магнитных переходных металлах и их сплавах по-прежнему остается одним из наиболее интересных с принципиальной точки зрения направлений магнитной нейтронографии. Дальнейший прогресс в теоретическом описании магнитных свойств переходных металлов и их сплавов тесно связан с экспериментальными исследованиями, которые должны дать точные и надежные сведения о распределении зарядовой и спиновой плотностей, спектре магнитных возбуждений, обменных связях, силах межатомного сцепления и других физических характеристиках кристаллов. Возможности магнитной нейтронографии предоставляют уникальные экспериментальные данные, в частности, о спектре магнитных возбуждений.

В настоящей работе показано, что широкий круг явлений в ферромагнитных переходных металлах и сплавах, изучаемых

с помощью рассеяния медленных нейтронов, можно последовательно описать с единой точки зрения, используя модель Хаббарда. Спектр магнитных возбуждений модели Хаббарда отражает двойственный характер поведения магнитоактивных d-электронов в ферромагнитных переходных металлах. Исследование свойств ротационной инвариантности гамильтониана Хаббарда показывает, что наличие спин-волнового акустического полюса у магнитной восприимчивости является прямым следствием ротационной симметрии системы, как и для модели Гейзенберга. Таким образом, акустическая спин-волновая ветвь — отражение определенной степени локализации d-электронов; характерная величина D, определяющая спин-волновую жесткость, непосредственно измеряется в нейтронных экспериментах. В отличие от зонной модели ферромагнетизма, основанной на предположении о полной коллективизации магнитных электронов, модель Хаббарда позволяет учитывать корреляционные эффекты. Поэтому с помощью модели Хаббарда можно в принципе описать (при достаточно точном учете корреляционных эффектов) большую совокупность не только магнитных, но и электрических свойств кристаллов. Уже простое приближение хаотических фаз позволяет достаточно удовлетворительно рассчитывать спектр магнитных возбуждений модели Хаббарда; данный спектр, помимо акустической спинволновой ветви, содержит континуум одночастичных стонеровских возбуждений. Наличие стонеровского континуума — проявление делокализации магнитных электронов.

Поскольку стонеровские возбуждения не возникают в модели Гейзенберга, их обнаружение и детальное исследование с помощью метода рассеяния нейтронов составляет одну из актуальнейших проблем физики магнитного состояния. Более того, следует ожидать, что измерения в «оптическом» диапазоне дадут более интересные результаты, чем те, которые можно предполагать на основании однозонной модели Хаббарда. Последняя модель, отражая основные черты поведения системы, сильно упрощена. Модель Хаббарда допускает естественные обобщения, позволяющие учитывать орбитальное вырождение d-уровней, $(s - d)$-гибридизацию, электрон-фононное и электрон-магнонное взаимодействие и т. п. Мы показали, что уже простейшие обобщения модели Хаббарда дают значительно более богатый спектр, причем именно в «оптическом» диапазоне. Спин-волновой акустический полюс сохраняется, если сохраняется ротационная инвариантность модифицированного гамильтониана.

Модель Хаббарда чрезвычайно эффективна для теоретического описания электрических и магнитных свойств сплавов переходных металлов. Введение случайных параметров позволяет смоделировать неупорядоченный сплав ферромагнитных переходных металлов. Модель Хаббарда со случайными параметрами содер-

жит в качестве предельных случаев большинство известных моделей систем с примесями. Использование приближения когерентного потенциала позволяет рассчитывать целый ряд физических величин, наблюдаемых в нейтронных экспериментах, в широком интервале концентраций примеси. При расчете коллективных характеристик сплава, таких, как спектр спин-волновых возбуждений и статическая электропроводность, важно последовательно учитывать корреляционные эффекты. В данной работе было показано, что энергию длинноволновых спиновых волн в сплавах ферромагнитных переходных металлов можно вычислить, используя приближение когерентного потенциала для описания неупорядоченности и общие соображения о ротационной инвариантности системы. Метод расчета, развитый Э. Коллей и В. Коллей, использует идеи микроскопической теории ферми-жидкости. При нулевой температуре в когерентном горизонтальном лестничном приближении для модели Хаббарда со случайными параметрами проведено самосогласованное вычисление ренормировки коэффициента спин-волновой жесткости за счет электрон-электронных корреляций. Коэффициент D получен численным образом и используется для определения устойчивости ферромагнитного состояния. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными по рассеянию нейтронов для сплавов на основе Ni показывает, что в области применимости наши расчеты хорошо согласуются с экспериментом. При низкой плотности предлагаемый подход позволяет более точно учитывать корреляционные эффекты, чем в приближении хаотических фаз.

Теория магнитных явлений в ферромагнитных переходных металлах и их сплавах ни в коей мере не завершена. Теория рассеяния медленных нейтронов в ферромагнитных переходных металлах, основанная на приближении хаотических фаз, нуждается в ряде уточнений [136, 215]. Спектр стонеровских возбуждений $\hbar\omega_{\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \Delta$ в более точном приближении [216] имеет вид

$$\hbar\omega_{\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + S(\mathbf{k}+\mathbf{q}).$$

Насколько хорошо применимо приближение хаотических фаз, следует судить по результатам эксперимента. В настоящее время также есть веские основания полагать, что более детальная теория неупругого рассеяния нейтронов в ферромагнитных переходных металлах должна учитывать зависимость кулоновской корреляции от квазиимпульса и орбитальное вырождение.

Большой интерес представляет дальнейшее теоретическое и экспериментальное исследование ферромагнитных сплавов переходных металлов. В последнее время рассеяние медленных нейтронов применяется для измерения коэффициента спин-волновой жесткости в ферромагнитных частично упорядоченных сплавах

[185, 217, 218]. В недавних теоретических работах по исследованию частично упорядоченных ферромагнитных сплавов [219—224] используются многие идеи, описанные в настоящем обзоре, в частности в [222], которая является дальнейшим развитием работы [199], разработана теория, позволяющая вычислять изменения коэффициента спин-волновой жесткости в зависимости от степени атомного упорядочения в ферромагнитных сплавах переходных металлов типа $A_{0,5}B_{0,5}$.

Предполагалось, что решетку сплава можно представить в виде двух взаимопроникающих подрешеток компонент A и B, так что все ближайшие соседи атомов из подрешеток A принадлежат подрешетке B, и наоборот. Степень атомного упорядочения характеризуется величиной p, которая представляет собой вероятность того, что атомы A (B) принадлежат подрешетке A (B). Вероятность того, что атомы A (B) принадлежат подрешетке B (A), равняется $(1 - p)$. Упорядоченное и полностью разупорядоченное состояния характеризуются значениями $p = 1$ и $p = 0,5$ соответственно. Параметр p связан с обычно используемым параметром дальнего порядка S уравнением $S = 2p - 1$. Электронная подсистема описывается гамильтонианом Хаббарда (69). Для описания структурной неупорядоченности использовался метод когерентного потенциала. Стандартное одноузельное рассмотрение позволяет получить систему уравнений, определяющую когерентный потенциал, числа заполнения и эффективный потенциал. Для вычисления энергии спиновых волн, как и в работе [199], использовались общие формулы (17), (86). Межэлектронная корреляция учитывалась в приближении хаотических фаз. Конфигурационное усреднение проводилось с учетом подхода Велицкого [212].

Для простой модели сплава проведены численные расчеты коэффициента спин-волновой жесткости в зависимости от параметра атомного порядка p при нулевой температуре. Выбор параметров соответствует случаю сплава NiFe, хотя плотность состояний используется слишком упрощенная. Последнее обстоятельство затрудняет прямое сравнение развитой теории с экспериментом, тем более что нейтронные измерения зависимости D от степени атомного порядка проводились для Ni_3Fe и Pd_3Fe. Тем не менее вычисленное поведение D в целом отвечает эксперименту, т. е. увеличение степени неупорядоченности приводит к спин-волновому «размягчению» системы. Дальнейшее теоретическое и экспериментальное изучение подобных систем весьма интересно. Метод неупругого рассеяния нейтронов в данной задаче — единственный метод проверки теоретических результатов.

Дальнейшее всестороннее теоретическое и экспериментальное изучение ферромагнитных переходных металлов и их сплавов приведет к углублению наших представлений о природе магне-

тизма, уточнению модельных теоретических представлений и применимости приближенных данных о их магнитных характеристиках, что имеет важное значение для приложений и понимания магнитных и электронных свойств этой обширной группы веществ.

В заключение мне хотелось бы выразить благодарность моим соавторам Л. Черу, Э. Коллей, В. Коллей за интересные и стимулирующие обсуждения. Я искренне благодарен моим товарищам по работе Н. М. Плакиде, В. Л. Аксенову и В. Б. Приезжеву за их большую помощь и внимание.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Введенский Б. А., Ландсберг Г. С.** Современное учение о магнетизме, М.—Л., ГИЗ, 1929, с. V.
2. **Вонсовский С. В.** Магнетизм. М., Наука, 1971.
3. **Изюмов Ю. А., Озеров Р. П.** Магнитная нейтронография. М., Наука, 1966.
4. **Marshall W., Lovesey S. W.** Theory of Thermal Neutron Scattering. Oxford at the Clarendon Press, 1971.
5. **Каллуэй Дж.** Теория энергетической зонной структуры. Пер. с англ., М., Мир, 1969.
6. **Слетер Дж.** Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. Пер. с англ. М., Мир, 1978.
7. **Федянин В. К.**— ЭЧАЯ, 1978, т. 9, вып. 4, с. 658.
8. **Hubbard J.**— Proc. Roy. Soc. A, 1963, v. 276, p. 238.
9. **Маттис Д.** Теория магнетизма. Пер. с англ. М., Мир, 1966.
10. **Кондратенко П. С.**— ЖЭТФ, 1964, т. 46, с. 1438.
11. **Хомский Д. И.**— ФММ, 1970, 29, 31.
12. **Adler D.**— Solid State Physics, 1968, v. 21, p. 1.
13. **Mott N. F.**— Adv. Phys., 1964, v. 13, p. 325.
14. **Куземский А. Л.** Препринт ОИЯИ, Р4-7225. Дубна, 1973.
15. **Куземский А. Л.** Препринт ОИЯИ, Р17-9239. Дубна, 1975.
16. **Куземский А. Л.** Препринт ОИЯИ, Р17-10965. Дубна, 1977.
17. **Куземский А. Л.**— ТМФ, 1978, т. 36, с. 208.
18. **Тябликов С. В.** Методы квантовой теории магнетизма. М., Наука, 1975.
19. **Edwards D. M., Fisher B.**— J. Phys. (Paris), 1971, v. 32, p. C1—697.
20. **Herring C., Kittel C.**— Phys. Rev., 1951, v. 81, p. 869.
21. **Foner S.** e.a.— Phys. Rev., 1969, v. 181, p. 863.
22. **Lederer P., Mills D. L.**— Phys. Rev., 1966, v. 148, p. 542.
23. **Wohlfarth E. P.**— Phys. Lett., 1962, v. 3, p. 17.
24. **Куземский А. Л., Чер Л.** Препринт ОИЯИ, Р17-9656, Дубна, 1976.
25. **Куземский А. Л.** Препринт ОИЯИ, Р17-12169, Дубна, 1979.
26. **Izuyama T., Kim D. J., Kubo R.-J.** Phys. Soc. Japan, 1963, v. 18, p. 1025.
27. **Wohlfarth E. P.**— Physica B, 1977, v. 91, p. 305.
28. **Shimizu M.**— Physica B., 1977, v. 91, p. 14.
29. **Edwards D. M.**— Physica B, 1977, v. 91, p. 3.
30. **Windsor C. G.**— Physica B, 1977, v. 91, p. 119.
31. **Moon R. M.**— Intern. J. Magnetism, 1971, v. 1, p. 219.
32. **Freeman A. J.**— Physica B, 1977, v. 91, p. 103.
33. **Forsyth J. B.**— Physica Scripta, 1977, v. 15, p. 69.
34. **Stoner E. C.**— Proc. Roy. Soc. A, 1933, v. 169, p. 339.
35. **Hunt K. L.**— Proc. Roy Soc. A, 1953, v. 216, p. 103.
36. **Shimizu M., Terao K.**— J. Phys. Soc. Japan, 1967, v. 23, p. 771.
37. **Thompson E. D.**— Phys. Lett., 1966, v. 23, p. 411.
38. **Thompson E. D.**— Phys. Lett. A, 1968, v. 28, p. 194.

39. **Wakoh S., Yamashita J.**— J. Phys. Soc. Japan, 1964, v. 19, p. 1342.
40. **Hodges L., Ehrenreich H., Lang N. D.**— Phys. Rev., 1966, v. 152, p. 505.
41. **Connoly J. W. D.**— Phys. Rev., 1967, v. 159, p. 415.
42. **Thompson E. D., Myers J. J.**— Phys. Rev., 1967, v. 153, p. 574.
43. **Yamashita J., Fukuchi M., Wakoh S.**— J. Phys. Soc. Japan, 1963, v. 18, p. 999.
44. **Phillips J. C.**— Phys. Rev. A, 1964, v. 133, p. 1020.
45. **Mattheiss L. F.**— Phys. Rev. A, 1964, v. 134, p. 970.
46. **Hodges L., Stone D. R., Gold A. V.**— Phys. Rev. Lett., 1967, v. 19, p. 655.
47. **Zornberg E. I.**— Solid State Commun, 1968, v. 6, p. 729.
48. **Wakoh S., Yamashita J.**— J. Phys. Soc. Japan., 1968, v. 25, p. 1272.
49. **Zornberg E. I.**— J. Appl. Phys., 1969, v. 40, p. 1279.
50. **Zornberg E. I.**— Phys. Rev. B, 1970, v. 1, p. 244.
51. **Callaway J., Zhang H.**— Phys. Rev. B, 1970, v. 1, p. 305.
52. **Wakoh S.**— J. Phys. Soc. Japan., 1971, v. 30, p. 1068.
53. **Callaway J., Wang C. S.**— Phys. Rev. B, 1973, v. 7, p. 1096.
54. **Asano S., Yamashita J.**— Progr. Theoret. Phys., 1973, v. 49, p. 373; **Callaway J., Wang C. S.**— Physica B, 1977, v. 91, p. 337.
55. **Mori N.**— J. Phys. Soc. Japan, 1969, v. 27, p. 307.
56. **Singh M., Callaway J., Wang C. S.**— Phys. Rev. B, 1976, v. 14, p. 1214.
57. **Cuthill J. R. e.a.**— Phys. Rev., 1967, v. 164, p. 1006.
58. **Tedrow P. M., Meservey R.**— Phys. Rev. Lett., 1971, v. 26, p. 192.
59. **Tedrow P. M., Meservey R.**— Phys. Rev. B, 1973, v. 7, p. 318.
60. **Paraskevopoulos D., Meservey R., Tedrow P. M.**— Phys. Rev. B, 1977, v. 16, p. 4907; Physica B, 1977, v. 91, p. 91.
61. **Pierce D. T., Spicer W. E.**— Phys. Rev. Lett., 1970, v. 25, p. 581; Phys. Rev. B, 1972, v. 6, p. 1787.
62. **Rowe J. E., Tracy J. C.**— Phys. Rev. Lett., 1971, v. 27, p. 799.
63. **Petersson L. G. e.a.**— Phys. Rev. B, 1976, v. 14, p. 4177.
64. **Wohlfarth E. P.**— Phys. Rev. Lett., 1977, v. 38, p. 524.
65. **Lonzarich G., Gold A. V.**— Canad. J. Phys., 1974, v. 52, p. 694.
66. **Edwards D. M.**— Canad. J. Phys., 1974, v. 52, p. 704.
67. **Kawabata A.**— J. Phys. Soc. Japan., 1970, v. 29, p. 890.
68. **Coutinho S., Tilley D. R.**— J. Phys. F., 1975, v. 5, p. 948.
69. **Wohlfarth E. P., Cornwell J. F.**— Phys. Rev. Lett., 1961, v. 7, p. 342.
70. **Cornwell J. F., Wohlfarth E. P.**— J. Phys. Soc. Japan., 1962, v. 17 (B-1), p. 32.
71. **Wakoh S., Yamashita J.**— J. Phys. Soc. Japan, 1966, v. 21, p. 1712.
72. **Cornwell J. F., Hum D. M., Wong K. C.**— Phys. Lett. A, 1968, v. 26, p. 365.
73. **Duff K. J., Das T. P.**— Phys. Rev. B, 1971, v. 3, p. 192; p. 2294.
74. **Gold A. V.**— J. Appl. Phys., 1968, v. 39, p. 768.
75. **Gold A. V. e.a.**— Intern. J. Magnetism, 1971, v. 2, p. 357.
76. **Maglic R., Mueller F. M.**— Intern. J. Magnetism, 1971, v. 1, p. 289.
77. **Singh M., Wang C. S., Callaway J.**— Phys. Rev. B, 1975, v. 11, p. 287.
78. **Schurer P. J. e.a.**— Phys. Rev. Lett., 1971, v. 27, p. 586.
79. **Stearns M. B.**— Physics Today, 1978, April, p. 34.
80. **Wohlfarth E. P.**— J. Appl. Phys., 1970, v. 41, p. 1205.
81. **Wakoh S., Jamashita J.**— J. Phys. Soc. Japan, 1970, v. 28, p. 1151.
82. **Batallan F. e.a.**— Phys. Rev. B, 1975, v. 11, p. 545.
83. **Wong K. C., Wohlfarth E. P., Hum D. M.**— Phys. Lett. A, 1969, v. 29, p. 452.
84. **Wohlfarth E. P.**— Phys. Lett. A, 1971, v. 36, p. 131.
85. **Stearns M. B.**— Phys. Rev. B, 1973, v. 8, p. 4383.
86. **Cheng C. H. e.a.**— Phys. Rev., 1960, v. 120, p. 426.
87. **Singal C. M. e.a.**— Phys. Rev. B, 1975, v. 12, p. 2808.

88. **Cable J. W. e.a.**— J. Appl. Phys., 1967, v. 38, p. 1247.
89. **Wohlfarth E. P.**— Phys. Lett. A, 1967, v. 24, p. 666.
90. **Pickart S. J. e.a.**— Phys. Rev., 1967, v. 156, p. 623.
91. **Allan G. e.a.**— Phys. Rev. Lett., 1968, v. 20, p. 933.
92. **Minkiewicz V. J. e.a.**— Phys. Rev., 1969, v. 182, p. 624.
93. **Mook H. A. e.a.**— J. Appl. Phys., 1969, v. 40, p. 1450.
94. **Komura S. e.a.** Neutron Inelastic Scattering. V. 2. Vienna, 1968, p. 101.
95. **Lowde R. D., Windsor C. G.**— Adv. Phys., 1970, v. 19, p. 813.
96. **Lowesey S. W., Windsor C. G.**— Phys. Rev. B, 1971, v. 4, p. 3048.
97. **Frikkee E.**— Phys. Lett. A, 1971, v. 34, p. 23.
98. **Cooke J. F., Davis H. L.**— AIP Conf. Proceedings, 1973, N 10, p. 1218.
99. **Mook H. A., Lynn J. W., Nicklow R. M.**— Phys. Rev. Lett., 1973, v. 30, p. 556.
100. **Shirane G., Minkiewicz V. J., Nathans R.**— J. Appl. Phys., 1968, v. 39, p. 383.
101. **Hennion B., Moussa F.**— Ann. Phys., 1972, v. 7, p. 233.
102. **Meyer A. J., Asch G.**— J. Appl. Phys., 1961, v. 32, p. 3305.
103. **Elliot R. J., Lowde R. D.**— Proc. Roy. Soc., 1955, v. 230, p. 46.
104. **Lowde R. D., Umakantha N.**— Phys. Rev. Lett., 1960, v. 4, p. 452.
105. **Spooner S., Averbach B. L.**— Phys. Rev., 1966, v. 142, p. 291.
106. **Gürmen E., Werner S. A., Arrott A.** Ford Scientific Research Staff Report, 1971, N D13.
107. **Stringfellow M. W.**— J. Phys. C., 1968, v. 1, p. 950; v. 2, p. 1699.
108. **Thompson E. D., Mook H. A.**— J. Appl. Phys., 1970, v. 41, p. 1227.
109. **Mook H. A., Nicklow R. M.**— Phys. Rev. B., 1973, v. 7, p. 336.
110. **Lynn J. W.**— Phys. Rev. B, 1975, v. 11, p. 2624.
111. **Cooke J. F., Lynn J. W., Davis H. L.**— Sol. State Commun., 1976, v. 20, p. 799.
112. **Frikkee E.**— Physica, 1966, v. 32, p. 2149.
113. **George P. K., Thompson E. D.**— Phys. Rev. Lett., 1970, v. 24, p. 1431.
114. **George P. K., Thompson E. D.**— Intern. J. Magnetism, 1970, v. 1, p. 35.
115. **George P. K., Thompson E. D.**— J. Phys., 1971, v. 32, p. C1—820.
116. **Thompson E. D.**— Phys. Rev. Lett., 1967, v. 19, p. 635.
117. **Mattis D. C.**— Phys. Rev., 1966, v. 151, p. 278.
118. **Ананьев В. Д. и др.** Препринт ОИЯИ Р13-4392. Дубна, 1969.
119. **Application** of a Pulsed Spallation Neutron Source. Report of Workshop held at ANL. 1973, ANL-8032.
120. **Ishikawa Y., e.a.**— Phys. Rev. B, 1977, v. 16, p. 4956.
121. **Weiss L., Urwank P.** Neutron Inelastic Scattering. V. 2. Vienna, 1978, p. 197.
122. **Stirling W. G., Smith A. J., Holden T. M.** In: Proc. Intern. Confer. on Magnetism. Amsterdam, 1976.
123. **Riedi P. C.**— Physica B, 1977, v. 91, p. 43.
124. **Argyle B. E. e.a.**— Phys. Rev., 1963, v. 132, p. 2051.
125. **Herring C.** In: Magnetism. Ed. G. T. Rado and H. Suhl. V. 4. Academic Press, 1966.
126. **Shimizu M. e.a.**— J. Phys. Soc. Japan., 1965, v. 20, p. 396.
127. **Kaul R., Thompson E. D.**— J. Appl. Phys., 1969, v. 40, p. 1383.
128. **Schlosser W. F.**— Phys. Lett. A, 1972, v. 40, p. 195.
129. **Aldred A. T.**— Phys. Rev. B, 1975, v. 11, p. 2597.
130. **Riedi P. C.**— Phys. Rev. B, 1977, v. 15, p. 5197.
131. **Shimizu M. e.a.**— J. Phys. Soc. Japan., 1966, v. 21, p. 1654.
132. **Aldred A. T., Froehle P. H.**— Intern. J. Magnetism, 1972, v. 2, p. 195.
133. **Riedi P. C.**— Phys. Rev. B, 1973, v. 8, p. 5243.
134. **Riedi P. C.**— J. Phys. F, 1973, v. 3, p. 206.
135. **Gold A. V.**— J. Low Temp. Phys., 1974, v. 16, p. 3.
136. **Cooke J. F.** In: Proc. Confer. Neutron Scattering. Gatlinberg, 1976.

137. Yamada H., Shimizu M.— J. Phys. Soc. Japan., 1967, v. 22, p. 1404; 1968, v. 25, p. 1001.
138. Kusemsky A. L. Acta Phys. Pol. A, 1976, v. 49, p. 169.
139. Ziman J. M.— Proc. Phys. Soc., 1965, v. 86, p. 337.
140. Anderson P. W., McMillan W. L. Theory of Magnetism in Transition Metals. Ed. W. Marshall. N. Y. Academic Press, 1967.
141. Heine V.— Phys. Rev., 1967, v. 153, p. 673.
142. Hubbard J.— Proc. Phys. Soc., 1966, v. 92, p. 921.
143. Beeby J. L.— Phys. Rev., 1966, v. 141, p. 781.
144. Ehrenreich H., Hodges L.— Methods. Comp. Phys., 1968, v. 8, p. 149.
145. Smith D. A.— J. Phys. C, 1968, v. 1, p. 1263.
146. Кикоин К. А., Максимов Л. А.— ФММ, 1969, т. 28, с. 43; ЖЭТФ, 1970, т. 58, с. 2194.
147. Kishore R., Joshi S. K.— Phys. Rev. B, 1970, v. 2, 1411.
148. Elk K.— Phys. Stat. Sol., 1971, v. 48, p. K93; JINR, E4-7030, Dubna, 1973.
149. Manohar C.— Sol. State Commun., 1971, v. 9, p. 2025.
150. Kuzemsky A. L.— Phys. Cond. Matter., 1974, v. 18, p. 179.
151. Плакида Н. М., Смирнов Л. С. Препринт ОИЯИ Р4-7371, Дубна, 1973.
152. Izuyama T., Kubo R.— J. Appl. Phys., 1964, v. 35, p. 1074.
153. Morkowski J.— Phys. Lett., 1966, v. 21, p. 146.
154. George P. K.— Physica, 1970, v. 49, p. 287.
155. Schneider J., Heiner E., Haubenreisser W.— Phys. Stat. Sol., 1972, v. 52, p. K17.
156. Yamada H.— J. Phys. Soc. Japan, 1976, v. 41, p. 753.
157. Bartel L. C.— Phys. Rev. B, 1973, v. 7, p. 3153.
158. Chao K. A.— Solid. State Comm., 1972, v. 11, p. 1633.
159. Павликовски А., Бухбиндер И. Л., Куземский А. Л., Препринт ОИЯИ Р4-8209, Дубна, 1974.
160. Velicky B., Kirkpatrick S., Ehrenreich H.— Phys. Rev., 1968, v. 175, p. 747.
161. Wolff P. A.— Phys. Rev., 1961, v. 124, p. 1030.
162. Fukuyama H.— Phys. Rev. B, 1973, v. 8, p. 4288.
163. Lederer P., Mills D. L.— Phys. Rev. Lett., 1968, v. 20, p. 1036.
164. Engelsberg S. e.a.— Phys. Rev. Lett., 1968, v. 20, p. 1040.
165. Fulde P., Luther A.— Phys. Rev., 1967, v. 170, p. 570.
166. Yamada H., Shimizu M.— J. Phys. Soc. Japan., 1970, v. 28, p. 327.
167. Moriya T.— Prog. Theor. Phys., 1965, v. 34, p. 329.
168. Inoue M., Moriya T.— Prog. Theor. Phys., 1967, v. 38, p. 41.
169. Hasegawa H., Kanamori J.— J. Phys. Soc. Japan., 1971, v. 31, p. 382.
170. Levin K., Bass R., Bennemann K. H.— Phys. Rev. Lett., 1971, v. 27, p. 589; Phys. Rev. B, 1972, v. 6, p. 1865.
171. Fukuyama H.— Phys. Rev. B, 1972, v. 5, p. 2872.
172. Fukuyama H.— AIP Conf. Proc., 1973, v. 10, p. 1127.
173. Hasegawa H., Kanamori J. J.— Phys. Soc. Japan., 1972, v. 33, p. 1599, 1607.
174. Fukuyama H.— J. Phys., 1974, v. 35, p. C4 — 141.
175. Schwartz L. e.a.— Phys. Rev. B, 1971, v. 4, p. 3338.
176. Валясек К., Зубарев Д. Н., Куземский А. Л.— ТМФ, 1970, т. 5, с. 280.
177. Эльк К. Препринт ОИЯИ, Р4-6985. Дубна, 1973; ФТТ, 1974, т. 16, с. 25.
178. Langlinais J., Callaway J.— Phys. Rev. B, 1972, v. 5, p. 124.
179. Kanamori J. e.a.— Physica B, 1977, v. 91, p. 153.
180. Harris R., Zuckermann M. J.— Phys. Rev. B, 1972, v. 5, p. 101.
181. Kato T., Shimizu M.— J. Phys. Soc. Japan., 1972, v. 33, p. 363.
182. Hatherly M. e.a.— Proc. Phys. Soc., 1964, v. 84, p. 55.
183. Lowde R. D. e.a.— Phys. Rev. Lett., 1965, v. 14, p. 698.

184. Hennion M. e.a.— Sol. State Comm; 1975, v. 17, p. 899.
185. Mikke K., Jankowska J., Modrzejewski A.— J. Phys. F., 1976, v. 6, p. 631.
186. Hennion M. e.a.— J. Phys. F., 1976, v. 6, p. 1303.
187. Mikke K. e.a.— Physica, 1977, v. 86—88 (B + C), p. 345.
188. Hennion M., Hennion B., Kajzar F.— Sol. State Comm., 1977, v. 21, p. 231.
189. Hennion M., Hennion B., Kajzar F. In: Neutron Inelastic Scattering, 1977. V. 2. Vienna, 1978, p. 171.
190. Hennion M., Hennion B.— J. Phys. F, 1978, v. 8, p. 287.
191. Hennion B., Hennion M.— J. Phys. F, 1979, v. 9, p. 557.
192. Hennion M., Hennion B.— Phys. Rev. B, 1979, v. 19, p. 348.
193. Doniach S., Wohlfarth E. P.— Phys. Lett., 1965, v. 18, p. 209.
194. Katsuki A.— Brit. J. Appl. Phys., 1967, v. 18, p. 199.
195. Thompson E. D.— Int. J. Quant. Chem., 1967, v. 15, p. 619.
196. Hill D., Edwards D. M.— J. Phys. F., 1973, v. 3, p. 1162.
197. Riedinger R., Nauciel-Bloch M.— J. Phys. F., 1974, v. 4, p. 1032.
198. Riedinger R., Nauciel-Bloch M.— J. Phys. F., 1975, v. 5, p. 732.
199. Edwards D. M., Hill D. J.— J. Phys. F., 1976, v. 6, p. 607.
200. Jezierski A.— Acta Phys. Pol. A, 1977, v. 51, p. 839.
201. Kolley E., Kolley W., Kuzemsky A. L. JINR, E17-11899. Dubna, 1978; ФТТ, 1979, v. 21, p. 3100.
202. Kolley E., Kolley W.— Commun. JINR, E17-11771. Dubna, 1978.
203. Kolley E., Kolley W.— Phys. Stat. Sol. (b), 1977, v. 81, p. 735.
204. Kolley E., Kolley W.— Phys. Stat. Sol. (b), 1978, v. 86, p. 397.
205. Бабанов Ю. А. и др.— ФММ, 1973, т. 35, с. 1123, 1132.
206. Kanamori J.— Progr. Theor. Phys., 1963, v. 30, p. 275.
207. Hirooka S., Shimizu M.— J. Phys. Soc. Japan., 1977, v. 43, p. 70.
208. Hirooka S., Shimizu M.— J. Phys. Soc. Japan., 1977, v. 43, p. 477.
209. Kolley E., Kolley W. JINR, E17-11821. Dubna, 1978.
210. Kolley E., Kolley W. JINR, E17-11960. Dubna, 1978.
211. Katsuki A., Wohlfarth E. P.— Proc. Roy Soc. A, 1966, v. 295, p. 182.
212. Velicky B.— Phys. Rev., 1969, v. 184, p. 614.
213. Abito G. F., Schweitzer J. W.— Phys. Rev. B, 1975, v. 11, p. 37.
214. Jezierski A.— Acta Phys. Pol A, 1977, v. 52, p. 413.
215. Cooke J. F.— Phys. Rev. B, 1973, v. 7, p. 1108.
216. Edwards D. M.— Proc. Roy. Soc. A., 1967, v. 300, p. 373.
217. Mikke M. e.a.— J. Phys. F., 1977, v. 7, p. L211.
218. Mikke M., Jankowska J. In: Neutron Inelastic Scattering 1977. V. 11. Vienna, 1978, p. 185.
219. Gautier F., Ducastelle F., Giner J.— Phil. Magazine. 1975, V. 31, p. 1373.
220. Poo G. S., Edwards D. M.— Phys. Stat. Sol. (b), 1976, v. 78, p. 287.
221. Yamada H., Shimizu M.— J. Phys. F, 1977, v. 7, p. L203.
222. Takahashi I., Edwards D. M.— J. Phys. F., 1978, v. 8, p. 2579.
223. Riedinger R. e.a.— J. Phys. F., 1979, v. 9, p. 337.
224. Khan M. A.— J. Phys. F., 1979, v. 9, p. 457.